DICTIONARY OF
ANALYTICAL CHEMISTRY

分析化学辞典

邓勃 主编 李隆弟 副主编

化学工业出版社

前　言

分析化学在其发展过程中，经历了三次大的飞跃。20 世纪初，分析化学从单纯的分析技术，发展成为一门以四大溶液平衡为基础的独立的科学——经典化学分析，这是分析化学发展的第一次大飞跃。20 世纪中叶，随着科学技术的发展，新的分析仪器和仪器分析方法的不断出现，引发了分析化学发展的第二次大飞跃，使之由以化学分析为主发展为以仪器分析为主的现代分析化学。20 世纪60～70 年代环境科学的兴起，20 世纪 80 年代以后生命科学的迅猛发展，对分析化学提出了更高的要求，不只要求进行一般的定性、定量和结构分析，还要求进行形态分析、微区表面与逐层分析、微区结构分析、快速反应动态分析、无损分析、在线分析等，大大扩展了分析化学的内容。在这种情况下，只用四大溶液化学平衡作为理论基础来处理和解决分析化学问题，已远远不够了，数学、统计学、信息论等学科的理论与计算机等新技术的引入，从而扩展了分析化学的理论基础，开发出了新的分析技术和方法，适应分析化学学科的发展。分析化学发展到现在，获得和解析分析数据的能力大大增强，采集和处理信息的速度越来越快，获得的信息量越来越大，采集信息的质量越来越高，已远远突破原来化学的范畴，发展成为一门多学科交缘的综合性的分析化学信息科学，此即分析化学发展的第三次大飞跃。

分析化学对促进其他学科的进步与国民经济发展的重要性，越来越为更多的人们所认识，因此，人们（包括从事与非直接从事分析化学的）也希望加深对分析化学的了解。《分析化学辞典》正是为适应这种要求而编撰的。编撰者应化学工业出版社之邀，参与本辞典的编撰工作，其初衷是希望本辞典的出版，能对人们加深对分析化学的内容、作用与发展的了解，并因此对各自的工作有所帮助和促进。

本辞典收集分析化学及其相关学科的词条约 5300 余条，内容

涉及分析化学基础、分离富集、原子发射光谱法、原子吸收光谱法、原子荧光光谱法、X 射线光谱法、紫外-可见分光光度法、红外光谱法、拉曼光谱法、化学发光法、分子荧光和磷光法、生物发光分析法、计算分光光度法、质谱分析法、电化学分析法、气相色谱分析法、液相色谱分析法、离子色谱分析法、电泳分析法、核磁共振波谱法、顺磁共振波谱法、X 射线光电子能谱法、俄歇电子能谱法、透射电镜和扫描电镜分析法、热分析法、核化学分析法、环境分析、生物医学分析、药物分析、商品检验、农业分析、分析仪器、标准与质量保证、数据处理和计算机应用等。

本辞典的词条撰写工作主要由清华大学分析中心的教师承担，同时还邀请了其他高等学校、科研院所和有关的分析检验部门的教师、研究人员和工程技术人员参加。他们在各自相关专业领域从事教学、科研和分析检验工作多年，有着深厚的基础理论知识与丰富的实践经验。他们在词条的选取、释义与文字的表述各方面都花费了大量的精力，付出了辛勤的劳动。在词条的选取方面，主要收集分析化学和分析测试中基础、常见和新出现的词条，也兼收了与分析测试直接有关的其他专业领域中的若干词条。对词条的释义，力求准确和简明扼要。在文字表述上，尽量做到深入浅出、通俗易懂。

参加词条撰写工作的人员有（按汉语拼音排列）：曹进、陈德朴、陈国南、陈家华、陈培榕、邓勃、邓斌、邓建籽、丁明玉、冯均、范世福、高静娴、柯建明、李勇、李建军、李隆弟、李美仙、李清文、李余增、罗国安、罗荣杰、孟惠民、闵顺耕、倪永年、潘灿平、潘坤永、钱葆龙、孙素琴、陶家珣、童爱军、王宝清、王洪波、王如骥、王宏、吴筑平、颜流水、郁鉴源、再帕尔·阿不力孜、张建英、张新荣、张荣林、周群、周锦帆、朱永法等。

邀请参与词条审稿工作的专家有（按汉语拼音排列）：邓勃、费维扬、傅若农、郭金梁、韩永志、何华焜、胡景炘、黄惠忠、李隆弟、李南强、倪永年、刘亚宁、卢利军、庞国芳、钱传范、钱久信、沈其封、苏焕华、田松柏、辛仁轩、许振华、严衍禄、赵振华、赵墨田、周公度、周锦帆、周天泽等。最后由邓勃与李隆弟审读与统编全部书稿。

为便于读者查阅，每一词条都有中、英文对照，有些词条还附有缩写。中文词条名按中文拼音排序，英文词条名按英文字母字顺排序编撰索引，所有有缩写的词条，其缩写名亦按英文字母字顺排序另行编撰附录。

在《分析化学辞典》的组稿与撰稿过程中，得到了清华大学分析中心的大力支持与帮助。各位撰稿人积极参与撰稿，各位审稿人认真审稿，他们为此付出了辛勤的劳动。化学工业出版社的责任编辑为本辞典的出版不辞劳苦，默默奉献。在此向他们表示衷心的感谢！

由于分析化学是一门正在迅速发展的学科，新的词汇和术语不断出现，要将其全部收集实难做到，同时限于本辞典篇幅，也不可能将所有有关的词汇和术语都收入其中，只好忍痛割爱了。从主观上讲，限于编撰者的水平，在词条的选取、释义与文字的表述各方面都难免存在这样或那样的不足、缺点，甚至错误，热诚欢迎各位专家与广大读者赐教，提出批评与改进意见。

邓　勃

2002.5.1

编 辑 说 明

1. 《分析化学辞典》是一部综合型的分析化学辞典，主要读者对象为大专文化程度以上分析人员，亦可供有关专业的人员和大专院校有关专业师生参考。

2. 本书主要收集分析化学和分析测试中基础、常见和新出现的定义、概念、常用的术语、分析方法、分析技术等，以及相关学科领域中与分析测试直接有关的词列为词条。在选择词条时，坚持宁缺不滥的原则，对译名和释义一时拿不准的词条，暂时不选。

3. 凡一个词条有多种称谓或译名的，均适当地在释文中加以说明。对其中常用的别称、简称，则列为参见条。

4. 有些术语，如灵敏度、最小检出量（浓度），在分析化学不同的专业领域，其定义或含义不尽相同，在释义时将予以说明。

5. 对于以外国人名命名的词条，按照译名的惯例尽量译为中文，并附原文。对于以缩写字母命名的分析方法或分析技术，译为中文有利于读者方便使用的，则译为中文，而译为中文后对使用反而不方便者，则不译为中文，仍以缩写字母作为词条名。

6. 对词条释义内容的基本要求，一是说清楚该词条的基本含义（是什么）；二是说明有什么用。由于本辞典所选词条涉及原理、方法、技术、仪器、术语等，而各个词条所涵盖的内容范围有多有少，因此，针对各个词条的特点，还做了一些其他的必要说明。在文字表述方面力求准确严格，通俗易懂。

7. 本辞典释文中分子量及原子量系相对分子质量及相对原子质量的简称。

8. 本辞典中涉及的计量单位均采用我国1984年公布的法定计量单位。物理量与单位的使用，执行《中华人民共和国国家标准GB 3100～3102—93 量和单位》所规定的原则与符号。对于非国产仪器使用中涉及的非法定计量单位，均在其出现的同时给出相应的法定计量单位及其换算关系。

9. 为了叙述方便和使语言简洁，本辞典在释文及一些词条的限定词语中对一些方法名称、仪器名称、物质名称、机构单位名称等使用了英语缩略语，这些缩略语的全称在本辞典中可以查到，其中文名称列于书末的附录中。

10. 本辞典目录及正文按词条汉语拼音顺序编排。为便于读者查阅方便，同时编辑了以词条汉字笔画为序和以英文字母字顺为序编排的索引，附于词条正文之后。化合物名称中表示取代基位置及数字和词条开头的数字不参加排序。以外文字母开头的词条，在编目时放在各类词条之最后，英文字母开头的词条排在希腊文字母开头的词条之前。

内 容 提 要

本书是一部分析化学综合性工具书，收集分析化学及其相关学科的词条约5300条，内容涉及分析化学的各个领域。对分析化学中重要的定义、概念、常用的术语、分析方法、分析技术等都分别列为词条，并对每一词条的含义都做了简明扼要的诠释。本书可供化学、化工、冶金、地质、环境、医药卫生、农业、商检与其他领域从事分析测试和借助于分析测试方法进行其他科技工作的人员，以及大专院校有关专业的师生参考。

目　录

词 条 目 录

（以汉语拼音排序）

C

D

E

F

G

H

J

K

L

M

N

O

P

Q

R

S

T

W

X

Y

Z

其他

A

吖啶衍生物 acridine derivatives 一种以吖啶环为母体的化合物，它能够在发生氧化还原反应时发生化学发光，是一类化学发光化合物的有效基本结构。吖啶衍生物最主要是光泽精。光泽精化学发光的发光体为 *N*-甲基吖啶酮，它的发射波长为445nm。

癌胚抗原 carcinoembryonic antigen;CEA 存在于胎儿肠、肝、胰等组织的一种糖蛋白，分子量2万。正常人血清CEA含量极低，癌变时可升高。最初在结肠癌和直肠癌组织中检出，后发现内胚层来源的其他组织的恶性肿瘤（如食管、胃、肝、胰腺癌等）中也能检出。故测定血液和体液中CEA含量，可辅助诊断结肠癌等恶性肿瘤。对肿瘤病人治疗评价、预后判断及复发转移的监测也有一定意义。

安培滴定法 aperometric titration 又称电流滴定法。将两电极插入被滴定体系中，接上直流电源后组成电解池。在加一定外电压条件下，测量滴定过程中电池电流变化以确定滴定终点。若仅两电极之一为极化电极，称为单一极化电极安培滴定法，如果极化电极用的是滴汞电极则为极谱滴定法。若两个电极均用极化电极则为双安培滴定法，又称死停终点法。安培滴定法能用于不同类型的测定，包括酸碱滴定、沉淀滴定、络合滴定和氧化还原滴定。

安培检测器 ampere detector 基于电化学检测池中溶质在工作电极表面被氧化或还原而产生电流的原理而设计的检测器。它由恒定电位器和三电极化学池组成，当溶质通过工作电极表面，在工作电极和参比电极之间施加高于溶质氧化（或还原）电位的恒定电压时，溶质将发生氧化（或还原）反应，两电极间产生电荷转移，形成电流，电流的大小与溶质的浓度成正比。

安息香酸 benzoic acid 学名苯甲酸。分子式 $C_7H_6O_2$，由甲苯氧化或三氯代苯基甲烷加水分解制得。无色结晶，熔点121℃。易溶于乙醇、氯仿、乙醚、丙酮，在四氯化碳、苯、二硫化碳中可溶，难溶于水、石油醚。



氨氮 ammonia- nitrogen; NH_3-N 氨氮（NH_3-N）以游离氨（NH_3）或铵盐（NH_4^+）形式存在于水中，两者的组成比取决于水的pH值。当pH值偏高时，游离氨的比例较高。反之，则铵盐的比例为高。在有氧环境中，水中氨可转化为亚硝酸盐、甚或继续转变为硝酸盐。测定水中各种形态的氮化合物，有助于评价水体被污染和“自净”状况。氨氮的测定方法，通常有纳氏比色法、苯酚-次氯酸盐（或水杨酸-次氯酸盐）比色法和电极法等。水样采集在聚乙烯瓶或玻璃瓶内，应尽快分析，必要时可加硫酸将水样酸化至 pH <2，于2～5℃下存放。

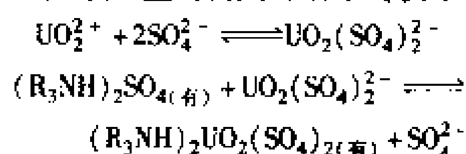
氨基键合相 amino-bonded phase 在硅胶基质表面键合上氨烷基作功能层的色谱固定相。如将3-氨基丙基硅烷与多孔硅胶反应，即可在硅胶表面结合上一层（单分子层）氨丙基。氨基键合相与酸性硅胶的色谱性能不同，它同时具有氢键给予体和接受体，对多功能基化合物的分离选择性高。氨基键合相可用作正相色谱、反相色谱和离子交换色谱的固定相。

氨基酸分析仪 amino acid analyzer 是专门用于分析氨基酸的色谱仪。最早的氨基酸分析仪采用强酸性阳离子交换树脂填料分离和柱后衍生化分光光度法或荧光检测，至今，它仍然占氨基酸分析仪的主流。采用反相分配色谱分离模式的氨基酸分析仪也已进入实用阶段，它是先将氨基酸衍生成具有可见光吸收或荧光发射的衍生物，然后在反相柱上分离，它不需要柱后反应装置，因此也可以在配有相应检测器的普通高效液相色谱仪上分析。

氨气敏（感）电极 NH_3 gas-sensing electrode 以pH玻璃电极作为指示电极，NH_4Cl为内电解质溶液构成的电极。需在碱性溶液中使用，通常在pH值大于10.5的情况下，才能使样品中的NH_3以溶解的自由态气体形式存在。电极对NH_3的测定范围为$10^{-6} \sim 1mol \cdot L^{-1}$。它已被广泛地应用于测定静止体系和流动体系血液中的NH_3。

铵态氮 ammoniacal nitrogen 一般包括土壤溶液中的铵、交换性铵、黏土矿物固定态铵中的氮素。土壤中呈交换性存在的铵态氮可被植物直接吸收利用，是速效性氮素。土壤中铵态氮测定的方法有纳氏试剂比色法、扩散吸收法、直接蒸馏法等，也可用氨气敏电极法和流动分析法测定。

铵盐萃取 ammonium salt extractionSmith 和 Page 首先报道了长链脂肪胺能萃取酸的性质。萃取机理主要是带有孤对电子的氮原子能和无机酸的H^+形成稳定的配位键而生成相应的铵盐溶于有机相。萃取时这些铵盐或季铵盐中的阴离子与水溶液中的金属络阴离子发生交换使被萃物进入有机相。例如，叔胺从硫酸溶液中萃取铀（Ⅵ）的反应可用下面两式表示



$$UO_2^{2+} + 2SO_4^{2-} \rightleftharpoons UO_2(SO_4)_2^{2-}$$

$$(R_3NH)_2SO_{4(有)} + UO_2(SO_4)_2^{2-} \rightleftharpoons (R_3NH)_2UO_2(SO_4)_{2(有)} + SO_4^{2-}$$

很多金属元素在水溶液中能形成络合阴离子，都可被胺类萃取剂萃取。

胺基的红外特征频率 characteristic amino group frequencies in IR 胺类化合物在红外光谱中的特征吸收峰有：N—H伸缩振动；N—H弯曲振动和C—N伸缩振动三种。N—H伸缩振动（ν_{NH}）吸收在$3509 \sim 3300cm^{-1}$范围。伯胺含有两个N—H键，有两个吸收峰，分别为对称和非对称的伸缩振动，其吸收强度比羟基弱，与羟基（ν_{OH}）的特征吸收峰形成明显的区别，脂肪族伯胺尤为如此。分子间氢键常引起ν_{NH}降低，缔合后吸收位置降低约$100cm^{-1}$。仲胺只有一种伸缩振动，其吸收峰比羟基的要尖锐。芳

香仲胺的吸收峰比相应的脂肪仲胺波数偏高，强度大。叔胺因氮上无氢，在这个区域没有吸收。N—H 弯曲振动（δ_{NH}）分面内和面外振动两种。伯胺的面内剪式振动（β_{NH}）吸收峰为中等强度，仲胺较弱，红外吸收在 1650 ~ 1550cm^{-1}范围。脂肪胺的 C—N 伸缩振动（ν_{C-N}）在 1230 ~ 1020cm^{-1}区，峰较弱。芳香胺的 C—N 伸缩振动在 1360 ~ 1250cm^{-1} 区，比脂肪胺的峰强的多。

暗场像 dark-field image 在透射电子显微镜中，用任一电子衍射束都可以成像，可以通过移动光栏来接受衍射束，也可以倾斜照明使所需要的衍射束沿物镜光轴通过，使视场区的背景变暗，这样所得到的像叫做暗场像。这样的暗场像揭示了对衍射束有贡献的那个区域。暗场技术的球差比选区电子衍射要小，并且整个试样上的衍射束强度分布均可分析研究，检验的尺度仅受像分辨率的限制。

暗视野显微镜 dark-field microscopy 在普通光学显微镜上安装上暗视野聚光器、带有遮光器的物镜，并且配有强光光源所构成的显微镜。通常用于观察活体细菌的动力、未染色的活螺旋体的形态和运动等。其基本原理是暗视野聚光器的中央为不透光，光线不能直接射入物镜，仅可以从四周边缘斜射到载物玻片的标本上，因光散射作用，标本上的细菌等物体发出光亮，而视野背景却为黑色。

凹面光栅 concave grating 在球面或非球面凹反射镜面上用刻划法或全息法制成的光栅。凹面光栅不但能完成色散作用，而且还可同时完成色散光束的聚焦作用，因此只用一块凹面光栅就可获得不同波长互相分离的谱线。在真空紫外光谱仪（或其他更短波长谱仪）中，因光源强度低、反射面反射率低、缺少有适当透明度的光学材料，凹面光栅的应用可以减少光学元件数目、提高信号检测的信噪比。

凹面光栅的光栅方程 grating equation of concave grating 通常凹面光栅采用球面反射镜作基底，在垂直于其弦面的方位、平行、等宽地在镜面反射膜上刻划出栅线，这种凹面光栅称为经典凹面光栅。理论推导可得凹球面光栅的光栅方程为 $d(\sin\alpha + \sin\beta) = m\lambda$，与平面衍射光栅方程相同。式中，$d$ 是光栅常数；α 是入射角；β 是衍射角；m 是光栅级数；λ 是入射光波长。

凹面光栅的聚焦方程 focusing equation of concave grating 凹面光栅方程给出衍射光方向与波长的关系式，凹面光栅聚焦方程则给出凹面光栅形成谱线的条件。凹面光栅的聚焦作用为：从入射狭缝上一点 A 射出的波长为 λ 的多条光线，不论它们以什么入射角 i 投射到凹面光栅上以 β 角衍射后，能被凹面光栅在同一点 A' 上形成衍射主极大，因而 A' 是 A 的像点。推导可得聚焦条件为

$$\left(\frac{\cos^2 i}{r} - \frac{\cos i}{\rho}\right) + \left(\frac{\cos^2\beta}{r'^2} - \frac{\cos\beta}{\rho}\right) = 0$$

由上面所得的凹面光栅子午光束聚焦方程可知：要形成明锐清晰的谱线，

入射狭缝、凹面光栅和谱线三者的相对位置必须符合严格的关系。上式中 r 为入缝上的发光点在子午面上的投影点到凹面光栅顶点的距离，r' 为谱线上相应像点在子午面上投影点到凹面光栅顶点之距离，ρ 为凹面光栅的曲率半径。

螯合萃取 chelation extraction 螯合物是由金属离子与多齿配位体形成的具有环状结构的配合物，难溶于水而易溶于有机溶剂。螯合萃取就是利用金属螯合物这一特性进行分离的萃取分离过程。如在 pH 为 9.0 的氨性溶液中，Cu^{2+} 与二乙基二硫代氨基甲酸钠（DDTC）形成疏水性螯合物，可被萃取到 $CHCl_3$ 中而与其他元素分离。许多螯合剂已被用于此萃取过程，利用螯合物萃取分离的元素已达 60 余种。

螯合滴定 chelatometric titration; chelatometry 见**配位滴定**条。

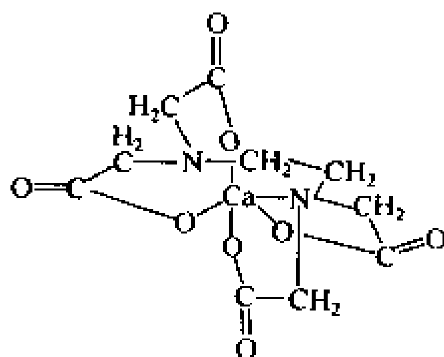
螯合剂 chelant 能与金属离子形成环状化合物（螯合物）的某些试剂，如氨羧络合剂以及多磷酸盐等。配位滴定中使用的 EDTA（乙二胺四乙酸及其二钠盐）就是一种最常用的螯合剂。

螯合离子交换剂 chelating ion exchanger 将具有螯合配位功能基团的有机分子接入基质表面后得到的离子交换剂。螯合基团能与金属离子形成稳定的螯合物，且具有一定的选择性，可用于金属离子的选择性分离。

螯合离子色谱法 chelating ion chromatography 以螯合离子交换剂作固定相的液相色谱法。利用螯合基团对金属离子的选择性，可以实现金属阳离子的选择性分离。

螯合树脂 chelate resin 具有螯合配位功能基团的高分子的共聚物。它是一种对金属离子有选择性螯合能力的离子交换树脂，其特点是能从大量共存离子中选择地分离待测离子。螯合树脂主要有以下几类：冠醚类、偶氮类、氨基羧酸（EDTA）类、水杨酸型及 β-二酮类、膦酸类、肟树脂、聚乙烯吡啶类和葡萄糖型等。目前最有实用价值且已商品化的螯合树脂是氨基羧酸类，例如：Chelex-100 和 Dowex-A 树脂。

螯合物 chelate 又称内络合物。一类具有环状结构的配合物。螯合即指成环，只有当一个配体至少含有两个可配位的原子时（该配体称为多齿配体）才能与中心离子形成环状结构，螯合物中所形成的环状结构常称为螯环。EDTA（乙二胺四乙酸及其二钠盐）与 Ca(Ⅱ)形成的螯合物的结构如图。



螯合纤维素滤膜 chelating cellulose filters 在纤维素滤膜（例如 Whatman-41）上含有螯合官能团，

从而能富集水样中的重金属。具有代表性的是 1980 年 Smih 制成了 2,2′-二氨基二乙基胺（DEN）官能团的纤维素滤膜（简称 DEN 滤膜）。DEN 滤膜的特点是：（1）不与碱和碱土金属起络合反应，即不吸附碱和碱土金属；（2）在 pH = 5 ~ 8 时对重金属离子的络合能力强；（3）膜上的螯合基因有稳定的分子结构，并牢固地固定在纤维素上。DEN 滤膜可看做非常短的螯合色层柱。在用于富集水中痕量重金属时，先将 pH = 5 ~ 8 的样品通过孔径为 0.4μm 的多孔膜以除去悬浮物，然后以 < 1ml · min^{-1} · cm^{-2}的流速通过装 DEN 滤膜的圆筒形过滤单元。对于过滤表面为 $10cm^2$ 的滤膜，可定量富集 1L 水样中的重金属，膜在干燥器内干燥后用 X 射线荧光测定样品中的重金属。

B

巴布科克氏法 Babock method 一种测法乳与乳制品中脂肪的方法。在巴布科克氏乳脂瓶中放入样品，加入硫酸，混合后置于乳脂离心机上离心分层，在特定条件下读取脂肪层的高度，即为脂肪的百分含量。

巴特莱检验 Bartlett's test 一种检验多个方差齐性（一致性）的统计方法。检验统计量是

$$B = \frac{2.303}{C}(f\log \overline{S}^2 - \sum_{i=1}^{m} f_i \log S_i^2)$$

$$\overline{S}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{m} f_i S_i^2}{\sum_{i=1}^{m} f_i}$$

$$C = 1 + \frac{1}{3(m-1)}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{f_i} - \frac{1}{f}\right)$$

$$f = \sum_{i=1}^{m} f_i$$

$$f_i = n_i - 1$$

式中，n_i 是计算方差 S_i^2 的测量次数；m 是被比较的方差数目。当由实验数据计算的 B 值大于由 χ^2 分布表查得在约定显著性水平 α 的临界值 $\chi^2_{\alpha,(m-1)}$ 值，表明各方差之间有显著性差异。巴特莱检验可用于不等测量次数所得到的多个方差齐性的统计检验。

白度 whiteness 红、绿、蓝三原色以适当比例混合可得到白色，白色也是一种颜色，其特点是具有较高的

反射率，而颜色纯度很低。白度是对白色的评价，是一个特殊的颜色属性，是心理物理量；对一组给定的白色样品，不同的观察者、或同一观察者用不同的评价方法，可能得到不同的评价结果；此外，白度的评价还与个人的习惯爱好有关。国际照明学会（CIE）曾推荐过白度评价公式，但也不是普遍使用满意的。在日常生活或工商业中的“白”样品，都存在普遍一致的目视评价意见：样品越暗越黄时白度越小。

白光干涉仪 white light interferometer 在FTIR光谱仪中由它来产生白光干涉图，用以控制数据采集的参比干涉装置。白光是复色光，其干涉图有一个非常锐的主峰，当该峰出现时，开始收集数据，以保证各次扫描所获得的干涉图都从同一起点开始采集。因白光干涉图灵敏度过高，系统光路若稍有变化，白光干涉信号会产生漂移，难于找到。另外，白光干涉一旦出故障，测量工作就无法进行。这给仪器的装配和调整带来很多困难。近年来新型的FTIR光谱仪器都取消了白光干涉仪，采用激光回扫相位差来确定采样初始位置。

白酒快速检验 rapid test of spirit 目前，出口白酒的快速测定是采用中和法测酸；皂化法测总酯；碱性品红比色法测甲醇；对二甲氨基苯甲醛比色法测杂醇油。也可采用气相色谱法同时测定出口白酒中酒度、甲醇、杂醇油（异丁醇+异戊醇）和总酯的含量。此方法的回收率为90.5%～107%，变异系数：甲醇≤6.3%、杂醇油≤0.4%、总酯≤1.3%。

白色分析体系 white analytical system 人们常用颜色来表示一个分析系统信息的完备程度，将内部信息已知的分析体系，称为白色分析体系。

白色污染 white pollution 是指日常生活和其他活动中产生的废弃塑料或制品。最常见的有废弃的日用塑料制品（如塑料鞋、台布、婴儿尿布、购物袋、垃圾袋、餐具、化妆品瓶、药瓶等）；废弃的农用塑料制品（如棚膜、地膜、育苗钵、渔网、管材等）。尤其是塑料包装物以及一次性使用的塑料制品，已成为城市生活垃圾的主要组成之一，容易被人们随意乱扔，且又不易被环境降解，从而对城市、陆地、海洋造成景观污染，破坏环境生态平衡，甚至危及野生动物的生命，因而这部分废弃塑料被人们指责为“白色垃圾”。国外常将此称之为“塑料垃圾”。

白色载体 white support 气-液色谱中常用的硅藻土型载体。与红色载体的制作过程相同，只是在煅烧前于原料中加入少量的助熔剂如Na_2CO_3。煅烧后，由于氧化铁变成了无色的铁硅酸钠络合物，而使天然硅藻土变成白色。与红色载体的化学成分基本相似，只是Na_2O和K_2O的含量较高，白色载体表面的孔径较粗约8～9μm，比表面积小，只有$1.0m^2\cdot g^{-1}$。机械强度不如红色载体，但表面活性中心显著减少，吸附性能差，与极性固定液配合较好，适用于分析

极性物质及氢键型化合物。

百分误差 percentage error 又称相对误差。参见**相对误差**条。

半保留复制 semiconservative replication 指双螺旋DNA在复制过程中，形成的子代DNA中含有一条属于模板DNA，另一条是新合成的。这种复制模式，称为半保留复制。其过程是：双链DNA先解开成为两条单链，然后以这两条单链为模板合成各自的互补链（子链），完成由一个亲代DNA分子变为两个相同的子代DNA分子的复制。

半波电位 half-wave potential; $E_{\frac{1}{2}}$ 在极谱波或伏安法中，极谱波或伏安曲线的上升部分，当总电流与残余电流之差等于极限扩散电流的一半时，指示电极的电位，即 $i=\frac{1}{2}i_d$ 时，$E=E_{\frac{1}{2}}$。当温度和支持电解质浓度一定时，某物质极谱波或伏安法的半波电位具有一定的数值，与该物质的浓度和所使用仪器的性能无关，这是极谱或伏安定性分析的依据。

半场跃迁 half-field transition 在测量三重态化合物的ESR谱时，除了能够在高场观测到正常的允许跃迁（$\Delta M_S=\pm1$）的信号外，在低场，由于M_S不再是好量子数，还可观测到禁阻跃迁（$\Delta M_S=\pm2$）的信号。对于常见的X波段ESR谱，$\Delta M_S=\pm1$的跃迁一般在300mT左右，而$\Delta M_S=\pm2$的跃迁则出现在150mT左右，约为允许跃迁共振磁场的一半，故称为半场跃迁，也叫半场线。半场跃迁是存在三重态的有力证据。

半萃取pH值 $pH_{\frac{1}{2}}$ value 溶剂萃取中当两相的体积相等，被萃物有50%被萃取时的pH值，称为该体系的$pH_{\frac{1}{2}}$。此数值对于形成金属螯合物类型的萃取来说，是表征各种金属萃取曲线的特性，对二价金属离子而言，$pH_{\frac{1}{2}}$的差值至少有两个pH单位才能一次分离完全；对三价金属离子，$pH_{\frac{1}{2}}$之差可以小一些。

半导体激光器 semiconductor laser 利用正向偏置下半导体的P-N结中电子与空穴的复合发生的装置，称为载流子复合半导体激光器，也称二极管激光器。输出功率一般在毫瓦量级，工作波长范围从可见光到约30μm红外光区，由所用激光材料决定。

半导体检测器 semiconductor detector 利用加了电压的半导体被射线照射时可以产生电流的原理制成的检测器。在X射线分析中常用的是Si（Li）半导体检测器，其最大的优点是具有很高的检测效率和能量分辨率，而且适用的能量检测范围大，覆盖了大部分轻元素和重元素特征X射线的波长范围。主要缺点是对所用的半导体材料要求较高，制作工艺复杂，对电子线路的要求也较高，而且需在液氮温度下工作。

半导体探测器 semiconductor detector 一种用半导体材料制成的电离辐射探测器。它是通过核辐射作用于半导体耗尽区（探测器的敏感区）产生载流子而形成的电脉冲信号以探测核

辐射的器件。当辐射进入半导体中的耗尽区（p-n结），在价带产生自由空穴，在导带产生自由电子，在反向偏压电场作用下，电子向n侧区域迁移，空穴向p侧区域迁移，在半导体输出端产生电脉冲信号。产生电子-空穴对的数目与入射核辐射的能量成正比。探测器常用材料有硅、锗和化合物半导体。根据产生半导体耗尽区（p-n结）的方法不同，它分为四类：扩散结探测器、面垒型探测器、锂漂移型探测器和高纯锗探测器。前两类探测器适合于探测低能、重的带电粒子，对所有进入探测器灵敏区的重粒子，探测效率为100%。锂漂移型探测器的探测灵敏层厚，用于探测γ射线和高能粒子。高纯锗探测器是继锂漂移型探测器之后发展起来的一种新型γ探测器，对γ射线有很高的能量分辨率和较高的探测效率，在低温下使用但可在室温下保存，用于探测γ射线、能量低至几千电子伏特的X射线和高能轻带电粒子。半导体探测器结构简单，能量分辨率高，能量线性好，脉冲上升时间快，轻便，是最有发展前途的核辐射探测器。参见**核辐射探测器**条。

半电池 half cell 由一支电极与试验溶液构成的电化学体系，该体系无法知道电极的电位，也无法通电使体系进行电化学反应。由两个半电池组成的化学电池，其电动势为两个半电池的电位之差。参见**电极电势**条。

半定量分析 semiquantitative analysis 泛指那些对测定组分含量准确性要求比定量分析稍差的分析方法，其特点是简便、快速、费用低。常用于：（1）只希望得知被测组分的大致情况，以便进一步选择合适的更为准确的定量方法；（2）只要求分析速度快，不太追求成分的准确含量。例如，某种合金型号的确定，工业生产中的中间控制，法医学中毒物是否超过致死量的鉴定，产品中某些有害物质是否超过法定标准的分析等；（3）试样太少，暂没有理想的定量分析可采用等。

半峰电位 half-peak potential；$E_{\frac{p}{2}}$ 在线性扫描伏安法、循环伏安法和其他类似的方法中，当总电流与残余电流之差等于峰电流一半时指示电极的电位，其值为

$$E_{\frac{p}{2}} = E_{\frac{1}{2}} + 1.1\,\frac{RT}{nF}$$

由于半波电位$E_{\frac{1}{2}}$约在峰电位E_p和半峰电位$E_{\frac{p}{2}}$间的中点处，因此作为可逆波的判据可借助于

$$\left| E_p - E_{\frac{p}{2}} \right| = 2.2\,\frac{RT}{nF}$$

式中，n为电极反应的电子转移数；F为法拉第常数；R为气体常数；T为热力学温度。

半高峰宽 peak width at half-height 又称半宽度、半峰宽度、区域宽度、区域半宽度，是色谱峰高一半处的峰宽度，用$W_{\frac{1}{2}}$表示。半峰宽与标准偏差的关系为$W_{\frac{1}{2}} = 2\sigma\sqrt{2\ln 2}$；$W_{\frac{1}{2}} = 2.354\sigma$。参见**标准偏差**条；参见**保留时间**条。

半积分电流 semiintegral current 在线性扫描伏安法的实验条件下，测量的信号是一个电流的半积分值，它不随时间而变化。记为 m，单位为安·秒$^{\frac{1}{2}}$（$A \cdot s^{\frac{1}{2}}$）。半积分极谱法是以 m-E 的关系曲线为基础的电分析化学方法，当以滴汞电极为工作电极，对可逆体系的氧化波[在 $c_R(0,t)=0$ 时]m 的极限值

$$m = nFAD_R^{\frac{1}{2}}c_R^o$$

式中，A 为电极面积；D_R 为电活性物质的扩散系数；c_R^o 为电活性物质的本体浓度；n 为电极反应的电子转移数；F 为法拉第常数。

半抗原 hapten 又称为不完全抗原（incomplete antigen）。本身没有免疫原性，只有免疫反应性的物质。半抗原大多为小分子物质，大多数多糖、类脂、某些药物、简单化学物质等均属半抗原。半抗原单独作用无免疫原性，当与大分子蛋白质载体结合形成半抗原-载体复合物时，可获得免疫原性。该种复合物不但可以刺激机体产生针对半抗原的抗体，也可刺激机体产生针对蛋白质载体的抗体。

半谱带宽度 half band width 吸收谱带峰值强度一半处的谱带宽度，常用 $\Delta\nu_{1/2}$ 表示，单位为 cm^{-1}。一般情况下液体或固体有机化合物的红外吸收谱带的半宽度约为 5 ~ $20cm^{-1}$。

半熔法 semi-fusion method 亦称烧结法或劳伦士-史密斯法（Lawrence-smith Process）。分析测定中对用溶剂不能溶解的固体试样，特别是酸不能溶解的不溶性物质，需要采用熔融的方法处理试样。半熔法是一种采用碱性熔剂的碱性熔融法。为测定碱金属，它不是采用常用的含碱金属的碱性熔剂，而是采用 $CaCO_3 + NH_4Cl$ 作为熔剂与试样一起加热至半熔状态，使试样中碱金属元素以可溶性氯化物形式存在，进而用于分析测定。

半数感染剂量 median infection dose 简写为 ID_{50}。将一定剂量的感染因子与实验动物或培养系统接触，在一定条件下，使半数(50%)实验动物或培养系统受到感染的感染因子的剂量。

半数耐受限值 median tolerance limit; TLm 又称半数耐受浓度或半数存活浓度。在商检中又称为耐药中量。是将一定量或浓度的药物喂食鱼类等水生生物或其他实验动物，引起半数受检动物死亡的剂量或浓度。它是一个统计值，受被检动物个体差异的影响较小，代表性好，常用来表示毒物对鱼类等水生生物毒性的一个指标。

半数致死量 median lethal dose; LD_{50}; LD_{50} 致死量50%的简称。指能使动物个体数50%致死时的毒物量，或电离射线的射线量。个体的感受性差异显著时，使用最小致死量（MLD）更为方便。电离放射线的 LD_{50} 一般是采取强力的短时间的全身照射，并用照射后30d以内的被照射个体数有半数死亡的射线量来表示。如果不是30d，例如只观察到28d，

则多用$\frac{LD_{50}}{28}$或LD_{50}（28）来表示。

半衰期 half-life 放射性活度衰变到其初始活度一半的时间，以$T_{\frac{1}{2}}$表示。对特定的核素是特征的，根据半衰期可以进行核素的鉴定。半衰期与衰变常数λ的关系是

$$T_{1/2}=\frac{\ln 2}{\lambda}=\frac{0.693}{\lambda}$$

半微分电流 semidifferential current 在线性扫描伏安法的实验条件下，测量的信号是一个电流的半微分值，它不随时间而变化。记为e，单位为安·秒$^{-\frac{1}{2}}$（$A\cdot s^{-\frac{1}{2}}$）。半微分极谱法是以e-E的关系曲线为基础的电分析化学方法。当以滴汞电极为工作电极，对可逆还原波，在$E=E_{\frac{1}{2}}$时e具有极大值。

$$e_p=\frac{n^2F^2}{4RT}Avc_B^{\circ}D_B^{\frac{1}{2}}$$

式中，A为电极面积；v为电位扫描速率；D_B为电活性物质的扩散系数；c_B°为电活性物质的本体浓度；n为电极反应的电子转移数；F为法拉第常数；R为气体常数；T为热力学温度。

半微量分析 semi-micro analysis 定量分析中根据所用试样数量多少及操作规模进行的一种非基于严格标准的分类法。通常当试样用量为0.1～1g（或体积>10ml）时，称为常量分析；当试样用量为10～100mg（或体积1～10ml）时称为半微量分析；当试样用量为0.1～10mg（或体积0.01～1ml）时称为微量分析；当试样用量为0.1mg以下（或体积<0.01ml）时称为超微量分析。

半微柱 semimicro-column 内径为1～2mm的填充型色谱柱。

半月点 meniscus point 又称熔化点。固体试样在毛细管中加热熔融液化、试样崩解后在试样上部出现弯月面（meniscus）时的温度。固体自初熔至终熔，一般可分为五个阶段。各国药典方法对熔点测定及判断不尽一致，如英国药典方法以半月点作为熔点。参见**熔点**条。

半制备柱 semi-preparation column 用于实验室制备规模、比通常的制备柱尺寸小的色谱柱。通常内径为1～2cm，柱长为25～50cm。

半致死剂量 half-lethal dose 对生物有作用的物质如药物、化学制品，放射性物质或物理因素如射线足以引起生物群体半数个体致死的量。它反映了生物的敏感性，不同生物，甚至同一生物的不同品种具有不同的半致死剂量。

半致死浓度 median lethal concentration 衡量存在于水中的毒物对水生动物和存在于空气中的毒物对哺乳动物乃至人类的毒性大小的重要参数。毒物的致死效应与受试动物暴露时间有密切关系。在动物急性毒性试验中，使受试动物半数死亡的毒物浓度，用LD_{50}表示。如果用LD_{50}表示水中毒物对水生生物的急性毒性，必须在LD_{50}前指明暴露时间。

伴线 satellite line 在X射线荧光光谱学中，伴随主线出现在主线邻近的谱线。附有伴线的主线，也被称为

"母线"（parent line）。波长比母线短的伴线被称为短波伴线，反之，则被称为长波伴线。伴线的起源，多数是一个原子同时或几乎同时发生内层双电离、继而引起电子双跃迁的结果，在极少数的情况下，也可能来自三电离化的原子。伴线的起因与单电离原子所产生的谱线具有显著的区别，不能简单地用能级图列出。

包藏 occlusion 一种物质沉淀时，痕量共存离子吸附在正在生长的沉淀表面，而后又被随后的沉淀层覆盖机械地进入沉淀物中的现象。它是共沉淀现象的一种，这种包藏现象的发生，非晶型沉淀比晶型沉淀要多，快速沉淀比慢速沉淀要多。

包覆型离子交换剂 coated ion exchanger 通过氢键、吸附或静电相互作用，在载体的表面覆盖一层功能分子后得到的离子交换剂。其载体可以是未经修饰的有机聚合物微球、多孔硅胶微球，也可以是表面功能基化的某类其他色谱填料。

包覆型填料 coated packing material 通过氢键、吸附或静电相互作用在表面多孔型或全多孔型载体的表面覆盖一层功能分子层制得的液相色谱填料。其载体也可以是表面功能基化的某类固定相，功能分子通常都是一些有机大分子化合物，如三甲基乙二醇、聚乙二醇、聚酰胺、冠醚、胆汁酸等。

包结常数 inclusion constant 一分子将另一分子包结形成包结化合物（inclusion compound，clathrate compound）时的结合常数，是研究包结反应平衡、反应机理以及包结物结构的重要参数。影响包结常数的重要因素有包结晶格的形状、大小及其与客体分子的形状、大小是否匹配等。包结常数的计算通常可通过 B-H 方程、Hill 图、Scatchard 图等求得。参见 **Benesi-Hildbrand 方程**条、**Hill 图**条、**Scatchcard 图**条。

包结反应 inclusion reaction 一分子将另一分子包结形成包结化合物的反应。包结化合物最初的例子是 1945 年 H. M. Powell 发现的对苯二酚与甲醇的复合物结晶。该结晶中三个对苯二酚分子通过氢键作用形成笼状，甲醇分子被包结在笼中。一般的包结化合物都呈结晶态，其中的一分子形成隧道形、层状或网状等多种结构（称为主体），另一分子（客体）被包结在晶格中央。包结化合物中分子间作用力并不起主要作用，而包结晶格的形状、大小是否与客体分子相匹配是形成包结物，以及包结物稳定与否的重要因素。环糊精、杯芳烃、环芳烃、冠醚、穴醚以及大环多胺等与客体分子的反应也可视作包结反应。在超分子结构的设计以及主客体分子识别中经常利用包结反应。

包结化合物 clathrate compound 由主体的笼状（隧道或夹心）晶格，借分子间引力将客体包结形成的单相固体化合物。例如，氢醌与氩、氪、氙形成的笼状化合物；尿素分子通过氢键结合成螺旋状结构，包住某些脂肪烃、醇、酸、胺等分子所形成的化

合物；中央有孔可匹配客体的物质（如环糊精及泡沸石等）与许多有机分子形成的化合物等。可用于分离元素、化合物及异构体等。

包囊碘液染色法　iodine staining　显示粪便湿涂片中原虫包囊的一种染色法。染色后，包囊呈淡棕黄色，糖原泡呈棕褐色，核和拟染色体折光无色。

薄层板　thin layer plate　又称薄板、薄层。薄层板指薄层色谱中铺好薄层的玻璃板、塑料板或铝箔。铺薄层的材料多为各种吸附剂，必要时可加入黏合剂，以使薄层材料附着牢固。铺层可用干法，也可用湿法，即加水或其他溶剂制成浆状涂铺。可用手工铺层，也可用铺板机铺层，铺层的厚度一定要均匀，表面平整无裂痕。参见**薄层色谱法**条。

薄层扫描法　thin layer chromatography scanning　用一定波长和强度的光束照射薄层分离后的斑点，以光度计测量透射或反射光强度的变化，用以测定物质的含量。测定是在薄层扫描仪中进行的，在被测物质的最大吸收波长处，薄层板以一定速度顺着从起始线到展开剂前沿的方向移动，当斑点经过狭缝时，即开始记录其光密度，扫描出斑点的吸收峰，由峰高或峰面积即可测知样品含量。测量方式有：（1）透射法——光线垂直照射于薄层表面并穿过色斑，测量其透过色斑光的强度；（2）反射法——光线垂直照射于薄层色斑，测量色斑反射光的强度；（3）荧光法——在紫外光照射下色斑产生荧光，直接测量色斑所产生的荧光的强度，若色斑不产生荧光，用荧光薄层板层析时，用紫外光扫描到斑点处，荧光强度减弱，测得荧光减弱的值。由于薄层厚度不均匀等因素，可造成测量误差。新型的薄层扫描仪采用两种不同波长的双光束交替扫描和锯齿形扫描方式，并有校正曲线线性化器和背景修正附件，可使测量准确度提高。

薄层扫描仪　thin layer chromatography scanner　在纸色谱、薄层色谱中，显色后的纸或薄板上各组分的斑点可用薄层扫描仪进行斑点原位光谱扫描，根据其吸收曲线及最大吸收值与已知化合物对照进行定性，也可进行斑点的色谱扫描，根据斑点的峰面积或峰高与已知量对照进行定量。目前各国生产的薄层扫描仪规格不同，性能各异，但其测量的原理基本相同。参见**光密度计**条。

薄层色谱法　thin layer chromatography TLC　将吸附剂均匀地涂布在一块玻璃板、塑料板或铝箔上，形成厚度一般为0.25mm的薄层作为固定相，以适当溶剂作为流动相（称为展开剂），待分离的样品溶液以斑点的形式点在薄板的一端，当薄板在密闭槽内进行展开时，由于各组分被展开剂载带移动的距离不同而形成相互分离的斑点，经显色或直接利用薄层扫描仪进行定性、定量分析。按分离机理可分吸附、分配、离子交换、排阻、亲和等薄层色谱法。与纸色谱法相比，薄层色谱法分离效果较好，斑点较集中，分析时间也较短，是一种

常用的分离方法。参见展开剂条。

薄壳型离子交换剂 pellicular ion-exchanger 由具有较好刚性的固体惰性核（如低交联度的聚苯乙烯核）和核外一层带交换基团的树脂薄膜组成的离子交换剂。核中无功能基团，有一定疏水性。表层的离子交换薄膜和微孔树脂一样具有溶胀性，可进行离子交换。薄壳型阳离子交换树脂是将聚苯乙烯刚性基球置于热浓硫酸中反应数分钟，仅将其表面磺化，形成一层数十纳米的磺酸功能基层。薄壳型离子交换剂的传质速度快、柱效高，因为惰性核与流动相溶液接触时溶胀小，即使流动相的组成变化很大，也能迅速达到平衡，因此适用于梯度洗脱。薄壳型离子交换剂表面的离子交换体少，交换容量低（0.02mmol · g^{-1}左右），只适合作分析型色谱柱填料。这种树脂具有较高的分离效率。

薄壳型微珠载体 pellicular microbead support 以刚性的固体惰性微珠（如玻璃微珠）作基质，在其表面覆盖一层对色谱分离起实质作用的功能物质后所形成的色谱填料。这种填料的传质速度快、分离效率高，是高效液相色谱中一类新型填料。

薄膜法 film method 薄膜法是将样品制成厚度适当的透明薄膜后进行红外测定的方法，包括液膜法和固体薄膜法。首先用易挥发性溶剂 CCl_4、CS_2、$CHCl_3$ 或丙酮将样品溶解，然后将样品溶液滴在水平的玻璃板上，待溶剂挥发后样品即可成膜；也可把溶液直接滴在盐片上，在温室下成膜后，再用红外灯加热进一步驱除残留的溶剂，或采取冰冻干燥成膜。在驱除残留的溶剂时蒸发速度不宜太快，以免产生气泡，导致薄膜不平。若液体样品的挥发性较差，又不溶于 CCl_4 及 CS_2 等红外溶剂中，则可将液体样品直接夹在盐片中形成约 0.01mm 厚的液膜。若固体样品找不到合适的溶剂溶解，但在熔融时不发生分解，可用热压法制成薄膜。这种方法特别适用于测定能够成膜的高分子物质。液膜法的优点是操作简单，速度快，适于液体样品的定性鉴定。

饱和 saturation 对任一自旋体系，在产生共振吸收后，都存在使自旋再返回基态的弛豫过程。若微波功率非常大，以致弛豫过程不能使足够的自旋回到基态以维持平衡分布，就产生了所谓的饱和。当未达到饱和时，信号幅度（面积）随微波功率增大而线性增加。开始饱和时，如继续增加微波功率，信号强度增加的速度减慢，接着谱线展宽并降低，以致信号消失。

饱和甘汞电极 saturated calomel electrode; SCE 由汞和甘汞及饱和 KCl 溶液制成的电极，是实验室中最常用的参比电极之一。其电极反应为



$$Hg_2Cl_2 + 2e \rightleftharpoons 2Hg + 2Cl^-$$

饱和恢复法 saturation recovery 用强的脉冲式微波场辐照样品，使自旋体系先达饱和，然后用微弱的微波场监视谱线的复原过程。从谱线的强度变化规律便可测定纵向弛豫时间。现最常用的测量方法是，磁化强度由

一个准确的$\frac{\pi}{2}$脉冲(或组合脉冲)带到横向平面。横向分量用一个场梯度脉冲予以破坏或用相位循环予以消除,相当于使跃迁饱和。随后的磁化强度的恢复过程类似于反转恢复过程。

饱和回复法 saturation recovery method 简称SR法。PFT-NMR测T_1的方法之一。脉冲序列为$\frac{\pi}{2}-\tau$(变数)$-\frac{\pi}{2}-$采集FID$-t_R(\geqslant 5T_1)$,但是惟一不同的是在采集FID信号之后,第二个$\frac{\pi}{2}$脉冲施加之前,加一个均匀性破坏脉冲,暂时破坏静磁场的均匀性,以便消除残余的横向磁化强度,即消除T_2的影响,避免相位误差带来的偏差。此法对T_1较长的核的测量较有利,缩短脉冲间隔所费时间。参见**连续饱和法**条。

饱和转移电子自旋共振 saturation transfer ESR; ST-ESR 从常规的X波段ESR谱获取有关顺磁物种运动快慢的信息时,它所能研究的时间范围为$10^{-9}\sim10^{-6}$s。当运动速度慢于10^{-6}s时,ESR所观测到的就像是"静止"的顺磁物种。饱和转移电子自旋共振则可解决这个问题。现设所观测的自由基具有各向异性ESR参数,则分子轴与静磁场夹角不同的分子将在不同的磁场处发生共振。在具有某一夹角的自由基的共振磁场下,施加强的微波功率,则该自由基的ESR吸收发生饱和。因该自由基分子进行旋转运动,当正好转到满足正在观测的共振磁场的夹角时,则可观测到饱和对吸收的影响。一般需观测与磁场调制同相位及差90°相位的两种2次微分谱,通过谱图模拟等解析就可得到有关转动相关时间等信息。观测ST-ESR的条件为:一是不发生比自由基的转动相关时间更快的饱和减小,即有足够长的弛豫时间;二是需存在各向异性ESR参数。ST-ESR研究的大多是氮氧自由基。

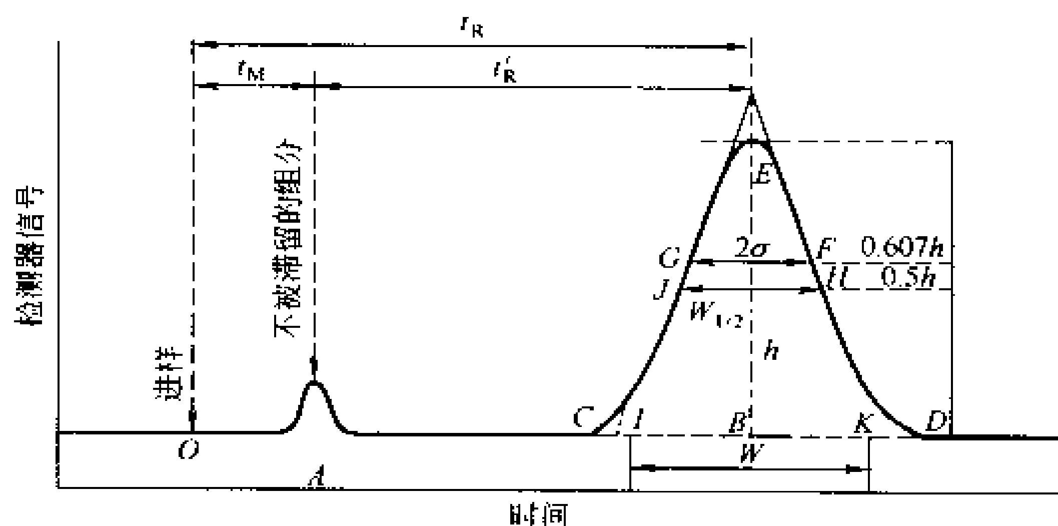
保护电位 protection potential 为达到电化学保护所必须达到的腐蚀电位临界值。

保护剂 protective agent 加入到试样中能防止被测元素与干扰组分形成难解离化合物的物质。其作用是与被测元素、或者与干扰组分(元素)生成稳定的配合物,或者与被测元素、干扰组分都生成稳定的配合物,以阻止干扰组分与被测元素之间生成难解离化合物。如加入EDTA,它与钙生成稳定的配合物,阻止磷酸根与钙生成难解离的化合物,从而消除了磷酸根对钙的干扰。

保护柱 guard column 又称预柱,是在分离柱之前安装的一根与分离柱相同填料的短柱,对分离柱起保护作用的色谱柱。当有污染物进入柱系统,首先被污染的是前面的保护柱,可以通过定期对保护柱进行清洗或更换来延长分离柱的使用寿命。保护柱不是必须部件,也可在色谱柱之前加装在线过滤器等来减少分离柱受污染的几率。

保留间隙 retention gap 在柱上进样时，利用一段经过去活处理后对任何溶质或溶剂都无保留作用的毛细管来消除或减少起始谱带的变宽，这段毛细管称为保留间隙。如果分析柱前有一段保留间隙，溶质和溶剂在保留间隙上无保留并随载气向前移动，挥发性溶质被溶剂聚集，高沸点溶质迁移到固定相被固定相聚集，使初始谱带变窄，解决溢流区太长而产生的峰分裂问题，并可保护分析柱，使柱寿命延长。参见**溢流区**条。

保留时间 retention time 被分离样品组分从进样开始到柱后出现该组分浓度极大值时的时间，也即从进样开始到出现某组分色谱峰的顶点时为止所经历的时间，称为此组分的保留时间，用 t_R 表示，常以分（min）为时间单位（如下图所示）。保留时间是由色谱过程中的热力学因素所决定，在一定的色谱操作条件下，任何一种物质都有一确定的保留时间，可作为定性分析的依据。



色谱图

保留体积 retention volume 被分离样品的组分从进样开始到柱后出现该组分浓度极大值时所流过的流动相体积，也即从进样开始到出现某组分色谱峰的顶点时为止的这段时间内所通过的流动相体积，用 V_R 表示，常以毫升（ml）为体积单位。保留体积 V_R 与保留时间 t_R 的关系为 $V_R = t_R \cdot F_0$，式中，F_0 为色谱柱出口流动相的流速，单位是 $ml \cdot min^{-1}$。

保留温度 retention temperature 在程序升温气相色谱法中各组分若是以色谱峰最高处相应的温度作为保留值时，其对应的温度则称为保留温度。参见**程序升温气相色谱法**条。

保留值定性法 retention qualitative method 一种色谱定性分析方法。在同一色谱操作条件下，任何一种物质都有一确定的保留值（保留时间、保留体积、保留距离）。因此，可以利用

已知物的保留值来对照被分离的未知物的保留值，当二者相同时，即判定未知物与已知物属于同一种物质。直接利用保留值来定性是色谱分析中最方便最常用的方法。保留值虽是常用的定性指标，但也有很大的局限性。

保留值沸点规律 boiling point rule of retention 是一个经验规律。实验证明，对同族具有相同碳原子数目的异构体来说，其各组分比保留体积 V_g 的对数与组分的沸点成线性关系

$$\log V_g = B_1 T_b + B_2$$

式中，B_1、B_2 为经验常数；T_b 为异构体的沸点。在色谱定性分析时，依照沸点规律，从已知组分保留值对数和相应的沸点作图得到的直线上，即可推知未知同族异构体组分相应的保留值（还可推测某些物质的沸点），与所得色谱图对照，便可进行定性分析。

保留值碳数规律 carbon number rule of retention 是一个经验规律。实验证实，在一定的柱温下，同系物各组分的比保留体积 V_g 的对数与其分子中的碳数成线性关系（碳数为1或2时可能有偏差）

$$\log V_g = C_1 n + C_2$$

式中，C_1、C_2 是与固定液和被分析物质分子结构有关的常数；n 为分子中碳原子的数目。依照此规律，只需用少数几种同系物组分确定 V_g-n 直线的斜率，就能推知其他未知同系物组分的保留值或碳数，与所得色谱图对照，便可进行定性分析。

保留指数 retention index 又称kov'ts 指数。一种利用保留值作为定性依据的较为可靠的参数，用 I 表示。保留指数定性方法是：选取两个相邻的正构烷烃作为标准物，其中一个碳数为 Z，另一个为($Z+1$)，待测物质 X 的保留值必须处于所选的两个正构烷烃之间，将正构烷烃的保留指数定为它的碳数乘以100，则待测组分 X 的保留指数可按下列公式进行计算。

$$I_X = 100\left[Z + \frac{\lg V_X - \lg V_Z}{\lg V_{Z+1} - \lg V_Z}\right]$$

式中，I_X 为待测物质 X 的保留指数；V_X、V_Z、V_{Z+1} 分别为待测物质和正构烷烃的净保留体积，根据计算得到的 I_X 值可与文献值对照进行定性分析。同一物质在同一柱上的保留值与柱温通常呈线性关系，可用内插外推法求出不同柱温下的保留指数。

保留指数定性法 retention index qualitative method 将待测组分与适当碳数正构烷烃的混合物作为样品，在合适的色谱条件下进行色谱分离，得到待测组分和正构烷烃的保留值，依据保留指数公式计算出待测组分的保留指数值，将该计算值与文献数据对照即可进行定性分析。为了准确起见，可将待测组分在极性固定相和非极性固定相上分别测得其保留指数，二者的差值还可用于推测组分的结构，有助于定性。参见**保留指数**条。

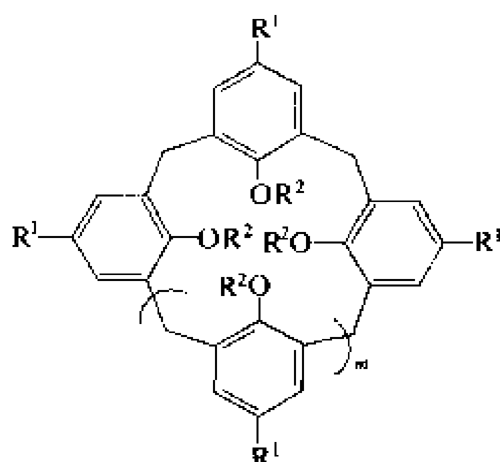
保证值 certified value 又称为标准值。用准确可靠的测量方法所确定的以平均值及其在一定置信水平的不确定度表示的标准物质的特性量值。保证值应在标准物质证书中确认。它是校准测量器具、评价测量方法、确

定材料特性量值和量值传递的依据。

报告基因 reportor gene 指那些表达产物极易被检测的基因。报告基因被用于任何一个被研究的启动子或调控元件连接，然后测定报告基因的表达程度，以此来检测启动子或调控元件的功能。在真核基因研究中，报告基因的选择必须符合下列两条原则：(1)报告基因应能在真核细胞中表达，其产物对转染的细胞无毒性，检测的方法简捷、灵敏、准确和稳定；(2)被转染的细胞内无相同或相似的内源性表达产物。目前常用的报告基因有氯霉素乙酰转移酶、荧光素酶、β-半乳糖苷酶和双氢叶酸酶还原酶等基因。

曝光量 light exposure 强度为 I 的光，在感光乳剂上产生一定的照度 E，若照射时间为 t，则照度 E 与曝光时间 t 的乘积即为曝光量。

杯芳烃 calix[n]arene 由苯酚与甲醛在氢氧化钠存在下加热反应得到的大环化合物的一种。由于其分子结构与杯相似，便取用希腊语中的 calix(杯)为词头，命名为 calix[n]arene，中文译名为杯芳烃。其中 n 代表苯酚的个数。基本骨架如图中 a、b 所示。在基本骨架的基础上对羟基进行修饰，引入具有不同配位能力的基团得到结构 c、e。其中 c 及 d 分别对 K^+ 和 Cs^+ 的结合能力高于冠醚，而具有羧基的 e 对假平面六配位结构的 UO_2^{2+} 不仅有很高的结合能力，而且有很好的选择性。



a：$m=1$，$R^1=t\text{-Bu}$，$R^2=H$

b：$m=5$，$R^1=t\text{-Bu}$，$R^2=H$

c：$m=1$，$R^1=t\text{-Bu}$，$R^2=CH_2COOEt$

d：$m=3$，$R^1=t\text{-Bu}$，$R^2=CH_2COOEt$

e：$m=3$，$R^1=SO_3Na$，$R^2=CH_2COOH$

贝类毒素检测 detection of shellfish toxins 贝类在养殖过程中由于食物链的传递和生物累积作用滤食了海洋中的有毒浮游生物，而在贝体中积累的一类毒性很强的非蛋白毒素，包括麻痹性贝毒、腹泻性贝毒、神经性贝毒、记忆缺失性贝毒。贝类毒素的检测方法有生物测定法和化学测定法，生物测定法主要是注射小白鼠法，化学测定法是将待测贝肉中的贝类毒素提取出来后用高效液相色谱定量测定。

备择假设 alternative hypothesis 进行统计检验时，在原假设 H_0 与事实有显著性矛盾的情况下予以接受的备用假设。如检验总体参数平均值 μ 和方差 σ^2 时，事先做出两种统计假设，一种是假设被检验的两个平均值或方差来自同一总体，记为 H_0：$\mu_1=\mu_2$ 和 H_0：$\sigma_1^2=\sigma_2^2$，另一种是假

设被检验的两个平均值或方差非来自同一总体，此假设记为 H_1： $\mu_1 \neq \mu_2$ 和 H_1： $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$。因为在进行统计检验时，总是先假设它们是来自同一总体，某一次抽样检验所获得的样本平均值或样本方差，可能有差异，先暂时假定造成此种差异的原因是随机误差，而总体平均值和总体方差是一致的，如果根据样本数据，按照一定的统计检验程序证实在一定显著性水平 α 下与原假设 H_0 没有显著性矛盾，就接受事先所作的统计假设 H_0；反之，若根据样本值进行检验的结果，在一定显著性水平 α 下与原假设 H_0 有显著性矛盾时，就拒绝原假设 H_0，而代之以接受另一备用假设 H_1。因此，将 H_0 称为原假设，H_1 称为备择假设。

背景电导 background conductance 在离子色谱中，淋洗剂溶液（流动相）本身的电导值。当基线平稳后，通常将此时的背景电导值设置为零，在进行样品分析时，溶质被洗脱下来，将使背景电导值增加或减小，形成正方向或反方向的色谱峰，淋洗离子与被测离子的摩尔电导率相差越大，则得到的响应值越大。

背景校正 background correction 对叠加在分析线上的背景吸收进行校正的操作。在摄谱法原子发射光谱分析中，测量谱线黑度时，采用强度相减扣除背景；在原子吸收光谱分析中，采用吸光度相减扣除背景。

背景吸收 background absorption 由非待测元素引起的对入射辐射的吸收。包括在原子化过程中产生的气体、氧化物、盐类等分子对入射辐射的吸收，固体微粒对光的散射，火焰发射、谱线重叠和结构背景等。在原子吸收光谱分析中，背景吸收重叠在分析线上，导致测量的吸光度值偏高，影响测定结果的准确度。校正背景吸收的方法有非吸收线校正法、连续光源校正法、塞曼效应校正法和自吸收校正法。

背散射电子 backscattered electron；BSE 当电子束与固体样品发生相互作用时，有一部分入射电子被固体样品中的原子所散射回来，该部分电子被称为背散射电子，又称为反射电子。可以分为弹性背散射电子和非弹性背散射电子，其中弹性背散射电子完全改变了入射电子的运动方向，但基本上不会改变入射电子的能量；而非弹性背散射电子不仅可以改变入射电子的运动方向，还可以不同程度地损失部分能量。利用背散射电子成像具有明显的阴影效应，具有很强的衬度，但容易失去许多细节。背散射电子一般来自表面层几个微米的深度范围，携带有体相材料的特性，其产率随原子序数的增加而增大。它不仅可以显示样品表面的形貌，还可以显示元素分布状态以及不同相成分区域的轮廓。利用背散射电子的信号强度可以获得背散射电子像。

背散射电子像 backscattered electron image 在电子束与固体样品的相互作用过程中，会产生大量的背散射电子。在进行微区形貌分析中，利

用背散射电子的信号与位置关系进行扫描就可以构成显微扫描图像，称为背散射电子像。在实际分析中，利用电子束扫描样品表面的一定区域，同时用探测到的被散射电子信号来调节阴极射线管的亮度，或用电子检测器就可以获得样品表面的形貌分布图。背散射电子像的反差主要来源于样品的成分变化以及样品表面的凹凸状态。因此，背散射电子像基本可以用来研究固体表面的形貌。

背散射电子形态像 backscattered electron topography image 以试样的表面几何形貌作为扫描电子图像的衬度来源的背散射电子像。因为背散射电子像具有带阴影光源的影像性质，因此从人眼来看，背散射电子像比二次电子像具有更丰富的立体感，也具有更大的反差，适合于样品表面的形态分析。

背散射分析 backscattering analysis；BSA 利用后角度的弹性散射进行分析的一种方法。当入射粒子与靶核发生碰撞，如果体系的总动能在碰撞前后保持不变，只是将自己的一部分动能转移给靶核使靶核发生反冲，而自己在靶核库仑场作用下偏离原来的运动方向，此称为弹性散射，又称为卢瑟福散射。具有一定能量的入射粒子在确定的散射角 θ 被散射，则散射粒子的能量与靶核的质量有一一对应关系，因此，可根据散射粒子的能量推测靶核原子的质量。散射角 θ 越大，质量分辨率越好，一般在 $\theta = 160° \sim 170°$ 方向探测散射粒子。从样品表面下不同深度 x 处与从样品表面被散射的粒子飞达探测器所具有的能量之差 ΔE 与深度 x 相对应，由背散射谱的能量坐标 $E(x)$ 处的计数，可以获得有关 x 处的杂质浓度的信息，据此可以进行杂质深度分析和薄膜厚度测量。

钡值 barium number 纤维经丝光后对氢氧化钡的吸收量，与丝光前对氢氧化钡吸收量的比值。在纺织品贸易中，常用此指标衡量棉织物丝光效果。通常本光棉布钡值为 100，丝光织物钡值在 135 ~ 150 之间，钡值在 150 以上表示棉纤维充分丝光。

倍频谱带 overtone band 见**泛频谱带**条。

倍数计量单位 multiple unit of measurement 按约定比率由给定 SI 单位形成的更大的计量单位。国际单位制的倍数单位由 SI 词头构成，为 10 进制和 10^3 进制，如长度单位米（m），倍数单位有千米（km）。

被测核素的 NMR 绝对灵敏度 NMR absolute sensitivity for detected of nuclei 考虑到核素的自然丰度 N 和被测核素的 NMR 特性，被测核素的 NMR 绝对灵敏度正比于 $\gamma^3 NI(I+1)$。γ 和 I 分别是某核的磁旋比和自旋量子数。参见**磁性核相对可接受度**条。

被测核素的 NMR 相对灵敏度 NMR relative sensitivity for detected nuclei 在外磁场相同，核数目相等，其他实验条件一样的情况下，以某种核的灵敏度 S_r 作为参考（常取 ^1H 或 ^{13}C 作参考，灵敏度为 1），其他核

的灵敏度 S 与 S_r 之比。在低频情况下有 $\frac{S}{S_r}=\left(\frac{\gamma}{\gamma_r}\right)^3\left[\frac{I(I+1)}{I_r(I_r+1)}\right]$，而对高频情况下有 $\frac{S}{S_r}=\left(\frac{\gamma}{\gamma_r}\right)^{\frac{11}{4}}\left[\frac{I(I+1)}{I_r(I_r+1)}\right]$。$\gamma$ 和 I 分别是某核的磁旋比和自旋量子数，下标 r 为参考核之意。

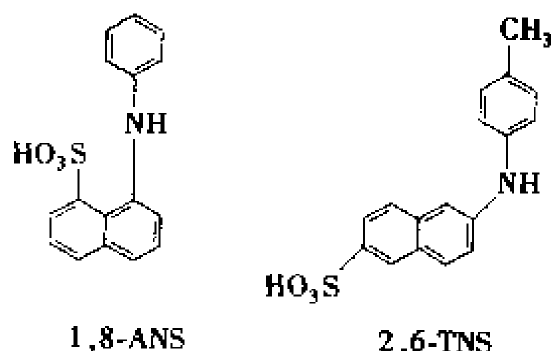
被测量 measurand 受到测量的量，包括已测得的量和待测量的量。

被动凝集试验 passive agglutination test 用于检测已知可溶性抗原的对应抗体的试验。先将已知抗原分子吸附到均匀一致的小颗粒（如聚苯乙烯胶乳、红细胞）上，当对应的抗体存在时，抗体与这些吸附在小颗粒上的抗原分子特异性地结合，使小颗粒发生肉眼可见的被动凝集。

本底 background 探测器上未放置放射性样品时测到的一定计数。本底的来源有宇宙射线、周围环境的放射性、电子学噪声。本底叠加到测量信号上，影响测量结果的准确性，需进行本底校正。通常是在测量样品放射性之前，先测量本底计数，再从样品放射性计数中减去本底计数，以得到校正本底后样品放射性计数值。

本底质谱图 background mass spectrum 在不导入样品的情况下，由清洗仪器的残留溶剂、样品记忆、真空泵油蒸气、色谱柱流失、载气以及各种污染所产生的质谱图，即为本底质谱图。如果本底质谱的离子峰多且很强，在进行样品测试时，不仅会影响仪器的最佳性能，还会成为样品谱图中的背景谱图（即本底谱图），干扰谱图的识别，需要扣除本底质谱图，才能得到真正的样品质谱图。

苯胺基萘磺酸 anilinonaphthalene sulfonic acid 常见的有 1,8-ANS(1-苯胺基萘-8-磺酸)和 2,6-TNS(6-对甲苯胺基萘-2-磺酸)。1,8-ANS 的分子式为 $C_{16}H_{13}NO_3S$，分子量 299.34。最大吸收波长在 265nm 和 350nm。最大荧光波长及量子产率为 515nm，0.004（水中）以及 468nm，0.32（乙醇中）。与极性溶剂中相比，其在非极性溶剂中的荧光波长向短波移动同时量子产率显著增加，因此是常见蛋白质、生物膜或溶剂极性等的荧光探针。2，6-TNS 的分子式为 $C_{17}H_{15}NO_3S$，分子量 313.37，与 1,8-ANS 一样也是常见蛋白质、生物膜或溶剂极性等的荧光探针。水中的最大吸收波长在 223，263，317，366nm。最大荧光波长及量子产率为 500nm，0.0008（水中）；429nm，0.52(乙醇中)；413nm，0.30(二氧六环中)；418nm，0.12(丙酮中)；466nm，0.14(乙二醇中)。1,8-ANS 和 2,6-TNS 结构式如图所示。



苯酚磺酸树脂 phenol sulfonic acid resin 以酚羟基和磺酸基作交换基团

的阳离子交换树脂。由于树脂中同时存在弱酸性基团酚羟基和强酸性基团磺酸基，所以作离子色谱固定相时，适合于一价和二价阳离子的同时分离。

苯肼比色法 colorimetric method with phenylhydrazine 一种测定维生素C含量的方法。脱氢抗坏血酸和2,3-二酮古洛糖酸与2,4-二硝基苯肼反应后产生红色的脎，在530nm下可用比色法测定脱氢抗坏血酸和2,3-二酮古洛糖酸的含量。将样品同5%偏磷酸溶液一起磨碎，以抽出液的上清液（可加$SnCl_2$以防氧化）为抽出液A；将抽出液A用H_2S还原，使氧化型维生素C全部变为还原型，得抽出液B。本方法直接测定抽出液A，可测定氧化型与2,3-二酮古洛糖酸的总量；测定抽出液B可得2,3-二酮古洛糖酸的含量。用2,6-二氯靛酚氧化抽出液A，本方法可测得还原型、氧化型及2,3-二酮古洛糖酸的总量，扣除2,3-二酮古洛糖酸的含量即为维生素C总含量。

泵激激光 pumped laser 光通过增益介质后，可以产生雪崩式的光放大作用，即具备一定特征的光子入射后，可以得到大量特征相同的光子的受激辐射。如果采用适当的方法和装置，就能使受激辐射以一定方式持续下去，就能形成一种光的受激辐射的振荡器。从这种装置中持续发射出大量特征相同的光子，这就是激光。而这种装置称为激光器。一般激光器都具有三个基本的组成部分：激励能源（或称泵浦源）、工作物质和光学谐振腔。因此激光又称为泵激激光。

比保留体积 specific retention volume 是指0℃时每克固定液的净保留体积，用V_g表示，单位是$ml \cdot g^{-1}$。其关系式为$V_g = \frac{273}{T_c} \cdot \frac{V_N}{m}$，式中，$T_c$为色谱柱的绝对温度；$V_N$为净保留体积；$m$为固定液的质量，单位为g。$V_g$值不受柱长、固定液含量和载气流速等操作条件影响，仅与柱温有关，V_g值可从有关文献中查到。

比表面积 specific surface area 单位质量物质的总表面积。是评价多孔性物质（催化剂、吸附剂等）的重要参数之一。例如，合成氨用的铁催化剂，比表面为$4 \sim 11m^2 \cdot g^{-1}$；活性炭的比表面为$500 \sim 800m^2 \cdot g^{-1}$。测定比表面积的常用方法有B. E. T.低温液氮吸附色谱法和室温下的流动吸附法等。

比对 comparison 一种通过对比试验来评价和确定分析质量和分析能力的方法。将给定物料的样品分发给各分析人员或实验室，各自独立地进行测定，对各测定结果进行统计分析，从而对分析人员或实验室的工作质量和检验能力做出评定。例如，比较用两种分析方法测定同一标准样品的特性量值来评价两种分析方法的等效性，由两个或多个实验室或分析人员分析同一样品或标准样品，检查各实验室和分析人员测定结果的准确度和精密度，以评价其分析测试水平和能力。

在计量工作中，比对是指在规定的条件下，对相同准确度等级的同种计量基准、标准或工作计量基准之间的量值进行的比较。主要用于现场没有更高准确度计量器具的情况。比对和检定在概念上是不同的，比对是通过比较来考核参与比对的各计量器具量值的一致性和统一它们的量值。检定是用高一等级准确度的计量器具与低一等级准确度的计量器具相比较，以评定被检定的低一等级准确度的计量器的计量性能是否合格。

比放射性活度 specific activity 又称放射性比度。试样中某种放射性核素的原子数与该元素在试样中的总原子数之比。对于非同位素载体样品，指单位质量物质所含某种放射性核素的放射性活度。它只表示单位时间内发生核衰变的次数，不表示放射性核素放出射线的能量和放射性的强弱，通常用贝可每毫克（$Bq \cdot mg^{-1}$）表示，$1Bq = 1$ 裂变 · s^{-1}。

比较法 method of comparison 一般适于做单项定性分析及有限分析。其过程是将标准样品与试样并列摄谱，如果试样谱线出现在标准样品光谱中的对应位置上，就可以判断某元素在被测样中的存在。此外尚有铁谱比较法，它不但可以做单项测定，还便于做全分析。因为铁谱在常用的光谱区域内有较多的谱线存在，这些谱线已做了精确的测定，将元素的分析线分别标在铁谱相应的位置上，也就是说铁谱成了一个天然的波长标尺，用以测量其他元素谱线之波长就非常方便了。

比例抽样 proportional sampling 不考虑样品变异性的大小，都按照同一的比例进行抽样。如分层抽样时，将样品总体划分为若干样品层，根据各样品层内样品变异性的大小确定各样品层应抽样本的大小，对变异性大的样品层多抽样，变异性小的样品层少抽样。但在事先不知道样品变异性大小的情况下，无法考虑各样品层变异性的大小，通常都按照同一的比例从各样品层抽样。

比例阀 proportional valve 可以按设定的比例同时抽取几种溶液进行混合的阀门。液相色谱中的低压梯度洗脱装置就是在高压泵之前加上一个比例阀，在常压下将几种溶剂按设定的比例在线混合之后，再泵入色谱体系。

比色分析法 colorimetric method 根据被测物质溶液颜色（被测物本身的或经过一定反应形成的有色物质的）深浅确定被测物质含量的一种分析方法，分为目视比色法和光电比色法。前者是使用一套质量、形状和大小相同的比色管，将试样溶液（被测物质含量未知）和一系列被测物质含量已知的标准溶液分别加入各比色管中，在相同条件下加入等量显色剂显色并冲稀至相同体积。日光下，肉眼对被测溶液的颜色与标准溶液系列（称为标准色阶）的颜色深浅进行比较，以确定被测物质含量。当被测溶液的颜色与某一标准色阶相近时，两者中所含被测物质含量相近；当被测

溶液的颜色介于两色阶的颜色时，则其中被测物质含量则介于这两个标准色阶液中被测物质的含量。这种方法的误差较大，但简便易行，适于大批量试样分析。现仍用于一些准确度要求不高，或不要求准确浓度的生产质量控制中，如要求控制某种组分的含量不小于多少，或某种杂质的含量不大于多少的生产控制。后者则是利用专门的仪器（光电比色计）进行这种颜色的比较，由于用光电池和滤光片代替人的眼睛进行测量，准确度比前者高，但后者已逐渐被更好的分光光度计代替。

比渗透率 specific permeability 描述色谱柱阻力的一个参数，用 B_0 表示。当气体通过一根色谱柱时，柱中填料（填充柱）或细小的管柱（毛细管柱），对气体有一定的阻力，毛细管柱的 B_0 大约是填充柱 B_0 的 10～100 倍。

$$B_0 = \frac{L\eta u}{\Delta p j}$$

式中，B_0 为渗透率；L 为色谱柱长；η 为柱温下载气的黏度；u 为平均载气线流速；Δp 为柱出口和进口压力差；j 为压力校正因子。

比吸收系数 specific absorption coefficient; absorptivity 表示分光光度法灵敏度的一种参数，以符号 a 表示。a 值相当于浓度为 $1\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 的待测物质溶液，用 1cm 长的吸收池测得的吸光度，以 $\text{ml}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$ 表示。a 值愈大，表示显色反应愈灵敏。它与表示显色反应灵敏度的另一参数——摩尔吸光系数 ε（单位是 $\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$）的关系为

$$a = \frac{\varepsilon}{\text{原子量}} \times 1000$$

a 值便于比较原子量（式量）不同的物质的显色反应灵敏度。

比吸收系数法 specific absorption coefficient method 见比值法条。

比旋光度 specific rotatory power 是衡量旋光性物质的旋光能力的尺度，通常对于溶液或纯液体有如下定义

$$[\alpha]_\lambda^t = \frac{100\alpha}{cl} \qquad \text{（溶液）}$$

$$= \frac{\alpha}{\rho l} \qquad \text{（纯液体）}$$

式中，$[\alpha]_\lambda^t$ 是在温度为 t（单位℃）时，用波长为 λ 的平面偏振光照射时的比旋光度；α 是实际测到的旋光度；l 是样品池的厚度（dm）；c 是溶液的浓度（g/100ml）；ρ 是纯液体的密度。通常用钠光 D 线(589.3nm) 在 20℃ 下进行测量，常记为 $[\alpha]_D^{20}$（或 $[\alpha]_{5893}^{20}$）。晶体的 $[\alpha]_\lambda^t$ 通常用 1mm 厚的晶体所引起的偏振面旋转角度来表示。此外，也常用摩尔旋光度 $[\phi]_\lambda^t$ 代替比旋光度 $[\alpha]_\lambda^t$

$$[\phi]_\lambda^t = \frac{[\alpha]_\lambda^t M}{10}$$

式中，M 是分子量。

比移值 R_f value 又称 R_f 值。在纸色谱法和薄层色谱法中，用 R_f 值来表示组分斑点移动的位置，是定性分析的一个重要参数。

$$R_f = \frac{\text{组分移动的距离}}{\text{溶剂前缘移动的距离}} = \frac{\text{原点至组分点中心的距离}}{\text{原点至溶剂前缘的距离}}$$

比值导数分光光度法 derivative ratio spectrophotometry 将导数技术应用于比值波谱的一种分光光度法。以混合物的波谱除以干扰组分的标准波谱得到比值波谱，以比值波谱对波长求导得到导数比值波谱。由此得到的波谱可完全消除干扰组分的吸光度贡献，从而完成对待测组分的测定。这种比值导数分光光度法能用较简单的导数技术完成波谱重叠的两组分的同时分析。如将导数比值波谱与零交点（zero-crossing）法相结合，还可完成波谱相互重叠的三组分的同时分析。国内外也有人将此法称作为比光谱导数分光光度法（ratio spectra derivative spectrophotometry）。

比值法 ratio method 利用吸光度的比值求出样品组分含量的一种方法。以两组分为例：设组分1的浓度为 c_1，它在波长1处的吸光系数为 a_{11}，在波长2处的吸光系数为 a_{21}；组分2的浓度为 c_2，它在波长1处的吸光系数为 a_{12}，在波长2处的吸光系数为 a_{22}。吸收池厚度为 b。则在波长1处和波长2处的总吸光度分别为：$A_1 = a_{11}bc_1 + a_{12}bc_2$ 和 $A_2 = a_{21}bc_1 + a_{22}bc_2$。设 $\frac{A_1}{A_2} = R, \frac{c_1}{c_2} = X$，则可导出

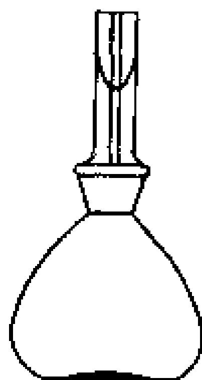
$$R = \frac{a_{12} + a_{11}X}{a_{21}X + a_{22}}$$

显然，当 a_{11} 远大于 a_{12}，a_{22} 远大于 a_{21}，则

$$R \cong \frac{a_{11}}{a_{22}}X$$

由吸光度比 R 可求出两组分的浓度比。若 $c_1 + c_2 =$ 常数，则可求得各组分含量。

比重瓶 gravimeter bottle 用比重瓶法测液体密度时专用的一种玻璃量器（见图）。它在一定的温度下有一定的容积。如将液体注入比重瓶中后塞好，多余的液体将从塞中的毛细管流出，比重瓶中液体的体积将保持一定。常用它来测定液体的密度。



设空比重瓶的质量为 m_1，充满密度为 ρ 的液体时的质量为 m_2，充满和液体同温度的纯水的质量为 m_3，比重瓶在该温度下的容积为 V，则

$$\rho = \frac{m_2 - m_1}{V}$$

$$V = \frac{m_3 - m_1}{\rho_o}$$

式中，ρ_o 为纯水的密度。从以上两式得出

$$\rho = \rho_o \frac{m_2 - m_1}{m_3 - m_1}$$

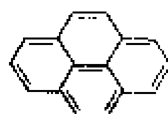
ρ_o 可以从表中查出，m_1，m_2，m_3 可

以用称重法测得，被测液体的密度 ρ 可从以上计算公式求得。

比浊法 turbidimetry 通过比较浊度而进行定量分析的方法。它分为目视比浊法和浊度测定法。目视比浊法是将标准溶液配成相应的标准浊度阶，通过目测法来确定物质的含量，它在野外分析、环境分析中有实际应用。浊度测定法则是在浊度仪中进行，它是基于将光照射到悬浊液上测定其透射光强度，从而求得溶液的浑浊程度即粒子浓度的方法。当粒子浓度很小、不发生二次散射时，浊度 $A_t = -\lg T = \lg \frac{I_0}{I} = \tau b$，式中，$\tau$ 是与粒子的浓度、大小和形状、入射光波长、粒子和溶剂折射率以及与仪器结构有关的常数；b 是比浊池厚度。在其他条件固定时，利用粒子浓度与吸光度的线性关系，由浊度的测定就能求得悬浊液的浓度。

比浊仪 turbidimeter 当一束光投射到浑浊介质（例如混水）中时，光将被介质中混杂的微粒散射，一部分光能量被微粒向四面八方散射。由于散射损失，入射时强度为 I_0 的单色光，透过一定厚度介质后的投射光强度 I 将小于入射光强度 I_0，$(I_0 - I)$ 或 $(I_0 - I)/I_0$ 可表征介质试样浑浊程度。比浊仪是专门用于检测试样浑浊度的仪器，原理上是一种光强度检测仪器。

芘 pyrene 分子式 $C_{16}H_{10}$，分子



量 202.26。无色片状结晶，熔点 156℃，沸点 360℃ 以上，存在于煤焦油中。与苦味酸形成1：1的电荷转移络合物结晶，可用于芘的精制。是一种常见的荧光探针，其荧光寿命长，容易形成激发态二聚体。环已烷中的最大吸收峰为 334nm，稀溶液的吸收峰在 390nm 附近。浓度增加在 480nm 附近呈现激发态二聚体的荧光峰。其酪酸或马来酰亚胺衍生物是长寿命的蛋白质的共价结合的荧光探针。

必需微量元素 essential trace element 是指缺乏该元素将引起机体生理功能及结果异常，发生各种病变和疾病的微量元素。Cotzias 制定的标准有 5 条：（1）这种元素存在于一切健康机体的所有组织中；（2）在组织中的浓度相当恒定；（3）缺乏该元素时，能在不同组织中产生相似的生理功能异常；（4）补充该元素能够防止此类异常变化；（5）补充该元素可使失常的功能及结构恢复正常。如铁、锌、铜、锰、铬、钼、钴、硒、镍、钒、锡、氟、碘、硅等 14 种元素均属于必需微量元素。

毕伐依特衍射对 Bijvoet pair 一对衍射如果用晶体的劳埃对称性衡量，是等效衍射，而用晶体的点群对称性衡量，则不是等效衍射，就称这对衍射为 Bijvoet 衍射对。J. M. Bijvoet 于 1951 年利用 Bijvoet 衍射对在强度上的差异测定了酒石酸钠铷晶体的绝对构型。

边缘效应 edge effect 又称边沿效应，在薄层色谱法或纸色谱法中，

当使用混合溶剂作展开剂时，出现同一组分在薄层（或纸）中部比在薄层（或纸）边缘处迁移速度缓慢的效应，即中部的 R_f 值比边缘的 R_f 值小，称此现象为边缘效应。产生边缘效应的原因是展开槽内的展开剂蒸气未达到饱和，因此，在展开时极性较弱或沸点较低的溶剂在薄层（或纸）的两个边缘易挥发，使边缘处的溶剂极性发生变化，组分的 R_f 值也随之变化。

编结式反应器 knitted reactor 又称 3-D 反应器（three dimensionally dis-oriented reactor）。是 FIA 系统所用部件之一。该反应器制作极为简单，即将适当长度的管子无规则的打结即可。载流通过空间变向通道的杂乱运动，能有效地促进径向分散，限制轴向分散，且不易滞留空气泡。这种流向突变的方式正是流动注射分析所需要的。

编码 coding 一种转换数据的方法。根据一组含义明确的数据转换法则，用离散的数字代码表示数据或信息，通过编码以代码或编码字符表示的数据，称为编码数据。要求逆转换时，又能将已转换为代码或编码字符逆转为编码之前的数据形式，此种逆转换称为译码（decoding），又称解码。

扁平池 flat cell 在测量 ESR 谱时，若样品为水溶液或极性溶液，对于矩型谐振腔常需要采用扁平池装样品。扁平池一般为石英制厚度约为 0.4mm 的矩型（约 40mm × 4mm）样品池。与毛细管相比，扁平池可大大增加样品的体积，从而提高 ESR 信号强度。将扁平池放人谐振腔时，需注意放置方向，即要使扁平池放在微波磁场最强而电场最弱的方向上，从而不致使样品产生过大的微波损耗。

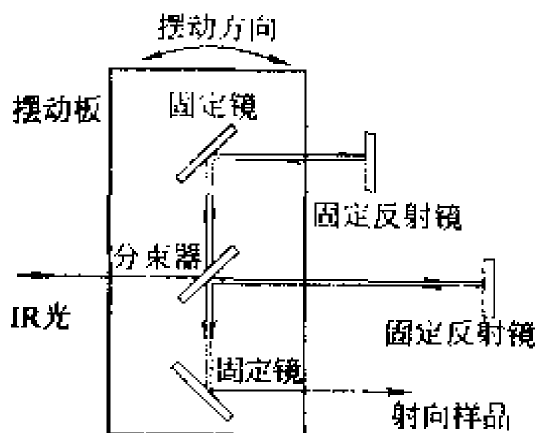
便携式色谱仪 portable chromatograph 体积小、重量轻、便于携带的小型色谱仪器。如在日本已经商品化的便携式离子色谱仪是将泵、进样器、柱温箱、电导检测器、数据处理机以及流动相和废液瓶全部放置在一个便携式箱中，总质量只有 15kg，既可以在野外用直流电，也可以在实验室用交流电驱动，特别适合于野外环境样品的快速分离与测定。

变磁性 metamagnetism 在弱磁场下磁化强度与磁场强度成比例地变化，当磁场强度大于某一定值以后，磁化急剧增加，产生与铁磁体同等程度的饱和磁化的现象称为变磁性。与铁磁性的区别在于不显示磁滞回线。自旋间的反铁磁性相互作用较弱的反铁磁体（$FeCl_2$、$FeBr_2$ 等），当加大磁场强度时，容易发生反铁磁性结构的破坏，显示变磁性。

变角 XPS 深度剖析法 angle varied XPS depth profile analysis; AVXPS 由于 X 射线激发出的光电子的能量比较弱，在与固体表面作用的过程中会不断地产生能量损失，最后有部分能量损失完的电子不能从固体表面出射。通过改变进入分析器的电子和样品表面间的夹角（即出射角）的方法就可以让来自不同深度的光电子进入能量分析器。这样可以得到不同角度的 XPS 谱。通过角度与取样深度的

对应关系，就可以得到样品随深度的分布信息。由于该方法不采用离子束等破坏性方式剥离样品，所以是一种非破坏性的分析方法。该方法的局限性是只能在很薄的范围内获得深度方面的信息（由逃逸深度来决定，一般 5nm 以内），并且获得的深度分布信息不是很直观。但对超薄表面的研究很有效，尤其是纳米薄膜以及表面吸附和化学反应的研究。

变角干涉仪 deformation interferometer 它是一种以干涉主体摆动来产生干涉光束的干涉仪，其原理光路如图所示。它取代了经典干涉仪中支撑在空气轴承上移动的动镜，因此改善了仪器的抗震性和稳定性。它和楔状干涉仪一样，不能用于快速扫描及高分辨率的光谱仪。



变角振动 deformation vibration 它是引起基团键角改变的振动，又称弯曲振动，用 δ 表示。它是基团键角向内向外变角的振动，是剪动。其实是弯曲振动的一种，是平面内的弯曲振动 δ 面内的一种。

变态反应 allergy 又称超敏反应（hypersensitivity）或过敏反应（anaphylaxis）。机体受同一抗原物质再次刺激产生的一种异常或病理性免疫反应。变态反应与免疫反应本质上都是机体对某些物质的特异性免疫应答，但前者主要表现为组织损伤和/或生理功能紊乱，后者则主要表现为生理性防御效应。变态反应产生的机制主要涉及两方面因素：（1）抗原物质的刺激；（2）机体的反应性。抗原物质刺激是诱导机体产生变态反应的先决条件，诱发变态反应的抗原称为变应原（allergen）或过敏原（anaphylactogen）。它可以是完全抗原，如异种动物血清、异种组织细胞、各种微生物、寄生虫及其代谢产物、植物花粉和动物毛皮等；也可以是半抗原，如青霉素、磺胺等药物以及燃料、生漆和多糖等物质。此外，受微生物感染、电离辐射、烧伤等生物、理化因素影响而使结构或组成发生改变的自身组织抗原，以及由于外伤或感染而释放的自身隐蔽抗原，也可以成为变应原。变态反应根据发生的机制不同，通常分为Ⅰ～Ⅳ型：Ⅰ型，速发型超敏反应；Ⅱ型，细胞溶解型或细胞毒型；Ⅲ型，免疫复合物型；Ⅳ型，迟发型超敏反应。前三型均由体液免疫介导，迟发型超敏反应是由细胞免疫介导的。

变温红外光谱 variable temperature infrared spectroscopy 通过顺序变温测量物体的吸收、反射和发射光的红外光谱来研究其物理、化学以及生物学性质及其过程。为此需用特殊设计的高温（室温以上数百度，甚至到

1300K)、低温（如约 500K 到液氮温度）的变温附件。变温光谱主要用于研究物质的相态变化、晶型转变、高聚物结晶度及结构的鉴定。高温附件更多地用做发射光谱。低温测得的光谱可使谱带变窄，有利于重叠谱带的分开；“热”谱带的强度明显降低，从而能鉴定“热”谱带。低温光谱可区分谱带的不同振动方式与同一振动方式的不同旋转异构体。

变异 variation 生物学上的变异泛指生物种与个体之间的种种差异，包括形态、生理生化以及行为习性等各方面的歧异，也包括遗传和不遗传的各种不同性状，如由遗传物质或环境因素或两者共同作用所产生的种种变化（包括遗传变异、环境变异、表型变异）。变异是生物进化和人类育种惟一可靠的根源。

变异系数 coefficient of variation 亦称相对标准偏差。是标准偏差 S 与测定平均值 $\bar{x}$ 之比。以符号 CV 表示

$$CV = \frac{S}{\bar{x}} \times 100\%$$

它表示随机误差的相对大小，用于比较在量纲或数量级上不同的测定数据的相对离散程度的大小。“变异系数”一词在现在的文献中已很少使用，现通用“相对标准偏差”这一术语。

标尺扩展 scale expansion 用来扩展量程、提高测量精度和实现浓度直读的一种技术。分连续可调式和分档可调式两种。标尺扩展的方法有：(1) 改变读数装置或显示器的灵敏度；(2) 利用反馈改变光电倍增管的负高压；(3) 改变模拟数字转换器振荡频率，随着振荡频率的增加，在计数电路中贮存和显示脉冲值按比例增加，从而改变标尺扩展的倍数；(4) 利用反馈改变运算放大器的增益，这是最常被采用的方法。标尺扩展对分析信号和噪声同时放大，不能改善信噪比和检出限。

标记 labelling 为了对物质分子进行定量、或获得该分子一部分或全部的信息，对该分子的一部分加以改变并加上记号的方法。标记方法有同位素标记和官能团标记两种。前者用放射性同位素或稳定同位素标记，即将含有同位素的化合物通过化学合成或生物合成接在目标分子上作为示踪物，然后通过测定放射性或进行质谱、核磁共振测定。还可以用两种以上的同位素同时标记，或用同一同位素标记两处以上的位置进行多重标记。同位素标记可以保持原分子的性质不变，是生物化学研究中用得最多的一种标记方法。官能团标记依目的不同可以在分子的末端接上荧光基团、具有紫外-可见吸收的生色团进行荧光标记或吸光标记，常用于氨基酸、核酸、糖及蛋白质等各类物质的分析检测。对生物大分子的活性中心，采用具有特异亲和性及高反应活性的分子进行修饰，也可进行亲和标记。用光照射进行的这类反应称为光亲和标记。在分子内引入荧光基团或顺磁共振基团作为探针可以研究分子的运动状态，后者称为自旋标记。

标记化肥 labelled fertilizer 其分

子的某一原子或某些原子为其放射性同位素或稳定性同位素所取代的各种化肥。标记氮肥所用的是放射性同位素^{13}N和稳定性同位素^{15}N；标记磷肥所用的是放射性同位素^{32}P。通过示踪实验可以深入了解各种肥料及不同施肥方法的肥效等。

标记化合物 labelled compound 化合物中一个或几个原子被可探测的放射性或稳定性核素所取代以作为示踪剂使用的化合物。它可分为三类：放射性同位素标记化合物、稳定性同位素标记化合物和非同位素标记化合物。放射性同位素标记化合物探测方法简便，测定灵敏度高，但有放射性污染和半衰期的限制；稳定性同位素标记化合物没有放射性和半衰期的限制，不会因辐射引起标记化合物本身的分解，但分析仪器比较复杂；理想的标记化合物最好是与被示踪化合物在物理和化学性质上相同，而非同位素标记化合物在这方面不如同位素标记化合物。标记化合物广泛应用于工业、农业、医学和科学研究中。

标记农药 labelled pesticide 其分子的某一原子或某些原子为其放射性同位素（如^{3}H、^{14}C、^{32}P、^{35}S、^{36}Cl等）或稳定性同位素（D、^{13}C、^{15}N等）所取代的各种农药。根据标记农药的示踪实验可以深入考察施农药的效果，残留农药在生态环境中的迁移规律等。

标记药物示踪实验 tracer test of labelled drug 利用放射性同位素中标记药物，研究药物在人或实验动物体内的吸收、分布、转移、代谢和排泄规律的一种有效方法。广泛地应用于新药的开发、药理研究、临床疗效预测等各个方面。

标准 standard 为在一定的范围内获得最佳秩序，对活动或其结果规定共同的和重复使用的规则、导则和特性的文件。它以科学、技术和实践经验的综合成果为基础，有关方面经协商一致制定并经一个公认机构批准。它以特定形式发布，作为共同遵守的准则和依据。按照标准的适用范围，分为国际标准，由国际标准化组织通过并公开发布的标准；区域标准，由区域标准化组织通过并公开发布的标准；国家标准，由国家标准机构通过并公开发布的标准；地方标准，在国家某个地区一级通过并公开发布的标准；也涵盖部门标准、行业标准和企业标准。按照标准化对象的特性分类，将常见的标准分为基础标准，具有广泛的普及范围或包含一个特定领域的通用规定的标准；术语标准，与术语有关的标准，通常带有定义，有时还附有注释、图表、示例等；试验标准，与试验方法有关的标准，有时补充有跟试验有关的其他的规定，例如抽样、统计方法的应用等；过程标准，规定一个过程应符合的要求以保证其适用性的标准；产品标准，规定一个产品或一类产品应符合的要求以保证其适用性的标准；包装标准，为保障物品在贮藏、运输和销售中的安全和科学管理的需要，以包装的有关事项为对象所制定的标准；服务标准，规定一项服务应符合的要求以保证其适用性的标准；安

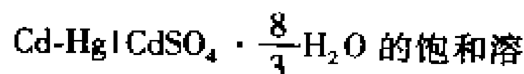
全标准，为保护人和物的安全为目的所制定的标准；卫生标准，为保护人的健康，对食品、医药和其他方面的卫生要求所制定的标准；环境保护标准，为保障环境和有利于生态平衡，对大气、水、土壤、噪声、振动等环境质量、污染源、检测方法以及其他事项所制定的标准；技术标准，对标准化领域中的需要协调统一的技术事项所制定的标准；管理标准，对标准化领域中需要协调统一的技术事项所制定的标准等。

标准 pH 缓冲溶液 standard pH buffers 国内外公认的在一定温度下具有准确 pH 值的缓冲溶液。大多数由一定浓度的逐级离解常数相差较小的两性物质或共轭酸碱对组成，例如，25℃时，饱和酒石酸氢钾（0.034mol·L^{-1}）的 pH = 3.557；由 0.025mol·L^{-1} KH_2PO_4 + 0.025mol/L Na_2HPO_4 组成的缓冲溶液在 25℃ 时的 pH = 6.865。

标准参考物质 standard reference materials 已确定其一种或几种特性量值，用于校准测量器具、评价测量方法或确定材料特性量值的物质。标准物质是国家计量部门颁布的一种计量标准，具有以下的基本属性：均匀性、稳定性和准确的定值。确定这类物质中的指定组分含量的标准值，需选用若干种不同原理、可靠的分析方法，由一定数量技术熟练的分析人员独立、仔细地进行分析，再由相关人员将所得分析结果集中，并利用数理统计方法加以分析处理，得出标准值及其不确定度。

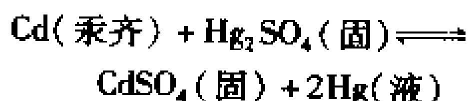
标准差控制图 S-control chart 用在较长时期内积累的预备数据建立起来的以监控产品特性量值的变动性的控制图。建立控制图的样本数 m 不得小于 25 个。控制图的纵坐标是产品特性量值的标准偏差，横坐标是抽样时间或样本序号，以各样本标准偏差的平均值$\overline{S}$为中心控制线，当各个样本容量相同时，以 $UCL = B_4\overline{S}$ 与 $LCL = B_3\overline{S}$ 分别为上、下控制限，绘制标准偏差控制图，其中 B_3 和 B_4 分别是与样本容量有关的系数，可从有关的统计书或手册中查到。标准偏差控制图通常与平均值控制图联合起来使用。

标准电池 standard cell 在测量或校准各种电池电势时作为标准用的一种化学电池。其电动势准确、稳定，且重复性好。现在国际上通用的标准电池是 Weston 电池。电极的负极是镉汞齐（约含 Cd 12.5%），正极由汞及固体硫酸亚汞（Hg_2SO_4）的混合物组成，电解质为饱和的硫酸镉溶液，其电池为



$$Cd\text{-}Hg | CdSO_4 \cdot \frac{8}{3}H_2O \text{ 的饱和溶液}, Hg_2SO_4(\text{固}) | Hg$$

电池反应是



$$Cd(\text{汞齐}) + Hg_2SO_4(\text{固}) \rightleftharpoons CdSO_4(\text{固}) + 2Hg(\text{液})$$

此电池在 20℃ 时的电动势为 E_{20} = 1.01846V，在其他温度值为 t 时的电动势按下式计算

$$E_t = E_{20} - [40.5 \times (t-20) + 0.95 \times (t-20)^2 - 0.01 \times (t-20)^3] \times 10^{-6}\text{V}$$

这种标准电池具有高度的可逆性，能长时间保持电动势稳定，温度系数较小，应用较广。

标准电动势 standard electromotive force; E° 电极反应各组分的活度均等于1时的电池的电动势。

标准方法 reference methods 经过充分试验用实验很好地确定了其精密度和准确度，并由国家主管部门、国际组织（如国际标准化组织，国际原子能委员会）或公认权威机构（如美国材料试验协会，英国标准化协会）颁布的方法。它在技术上不一定是最先进的，但是获得广泛认可、可靠的成熟的方法。国家技术监督局颁布的分析检验标准方法，按性质分为三类：强制性标准、推荐性标准和行业标准。它可以直接用于高准确度的测量、标准物质的定值、仲裁分析和评价其他方法的准确度。

标准放射源 standard source of radioactivity 其放射性活度经过精确测定的、公认可作为放射性活度计量标准的放射性物质或制品。它分为固体标准源、液体标准源和气体标准源。标准放射源的放射性活度用绝对测量或相对测量定值，前者是直接测量发射粒子并经过各种因素校正得到活度值，后者是用已经准确定值的标准放射源为基准，进行测量比较而得到活度值。放射性活度的国际单位是贝可（Bq）。标准放射源除了放射性活度定值准确外，还要求物理化学性质稳定，放射性核素的半衰期较长，核纯度较高。

标准光谱集 compilation of standard spectra 认真测得的大量化合物及商品的光谱图集，为定性分析提供了大量的参考光谱和信息。为了便于查找与参考，常以化合物名称（按字母顺序）、分子式（按碳、氢、卤素、氮、氧、磷、硫、硅、金属离子……元素的数目和次序）、分子量、吸收峰的波长和官能团字顺六种方式汇成索引。目前手工检索方式还比较普遍。采用电子计算机检索光谱的方式将很快占主导地位。目前常用的红外标准光谱图有：萨特勒标准光谱（The Sadtler Standard Spectra）（包括光栅光谱和棱镜光谱）、API 红外光谱（American petroleum Institute Research Project44）、Aldrich 红外谱图集（The Aldrich Library of Infrared Spectra）、R. A. Nyquist 和 R. O. Kagel 编著的《无机化合物红外光谱》（Infrared Spectra of Inorganic Compounds）、D. O. Hummel 和 F. Scholl 编著的《聚合物，树脂和添加剂的红外分析》卷 I 第二部分和卷 II（Infrared Analysis of Polymers, Resins & Additives An Atlas. Vol. I part two; Vol. II）等。现在可利用计算机软件进行检索的有 EPA 气相色谱库和 SADTLER Spec-Finder 数据库等。前者由美国国家环境保护局（EPA）所提供。它适用于 GC/FTIR 联机系统的检索。

标准化 standardization 为获得最佳秩序和社会效益，在经济、技术、科学及管理等领域内，对实际的或潜

在的问题制定共同的和重复使用的规则的活动。通过制定、发布和实施标准，可以达到规范社会商品市场，维持正常的经济秩序，提高产品质量，改进服务的适用性，保护消费者的正当权益，防止贸易壁垒、促进国际间和国内各部门各单位之间的科学技术交流和合作。标准化的级别分为国际标准化，所有国家有关机构都可参与的标准化；区域标准化，仅世界某个地理、政治或经济区域内的国家的有关机构均可参与的标准化；国家标准化，在某个国家一级进行的标准化；地方标准化，在某个国家的某个地区一级进行的标准化，也包括在一个行业（如：各部），地方一级，行业协会及公司一级，独立的工厂、车间和业务室进行的标准化。

标准回归系数 standardized regression coefficient 消除了因变量 y 与自变量 $x_i(i=1,2,\cdots,m)$ 所取量纲的影响之后的回归系数。在多元回归分析中，各自变量的回归系数大小与其所用单位有关，各自的回归系数大小不能直接表征它们对因变量 y 的影响程度。若将各回归系数 $b_i(i=1,2,\cdots,m)$ 转换为标准回归系数 b_i'

$$b_i'=b\sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{n}(x_{ij}-\overline{x}_i)^2}{\sum_{j=1}^{n}(y_j-\overline{y})^2}}$$

则可消除自变量单位的影响，b_i' 绝对值的大小直接反映了 x_i 对 y 的影响程度。将影响大的自变量保留，影响很小的自变量可以略去，从而可以得到最优回归方程。

标准加入法 standard addition method 一种广泛用于消除实际样品中共存组分干扰，测定试样中被测组分含量的方法。按测定方法先测定试样的信号（如吸光度 A_0），然后将不同量的被测组分的标准溶液加入到试样中，再按同样的方法测定，可得一系列对应不同加入量的信号（如吸光度 A_1、A_2，…）。由信号(A)对标准溶液加入量作图，将直线外推到横轴，即可得出试样中被测组分的含量。

标准(偏)差 standard deviation 表征测定值离散性的一个特征参数。从总体抽取容量为 n 的样本进行重复测定，由所测得的 n 次测定值计算得出，以 S 表示。

$$S=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2}{n-1}}$$

其特点是：(1) 全部测定值都参与标准差的计算，充分利用了得到的所有信息；(2) 对一组测定值中离散性大的测定值反应灵敏，当一组测量中出现离散性大的测定值时，标准偏差随即明显变大；(3) 是总体标准差 σ 的无偏估计值，用来量度测定的精密度是最有效的；(4) 不具有加和性。在数据处理中应用非常广泛。

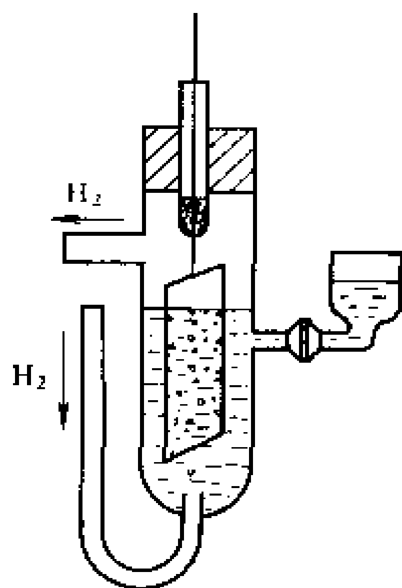
标准偏差的标准偏差 standard deviation of standard deviation 表征标准偏差离散性的参数。标准偏差是一个随机变量，由不同的样本得到的标准偏差是不同的，它的离散性用其标准

偏差表示，称之为标准偏差的标准偏差，记为 σ_S

$$\sigma_S = \frac{\sigma}{\sqrt{2(n-1)}}$$

式中，σ 是测量值的标准偏差。当测量值的数目 n 小于51时，σ_S/σ 大于10%，即标准偏差的第二位已是不确定的。因此，在通常的分析测试中，n 小于51，标准偏差最多取两位有效数字。

标准氢电极 normal (standard) hydrogen electrode; NHE (SHE) 最重要、最准确的参比电极之一。其结构如下图所示。用电镀法在铂片上镀上一层铂黑，插入含有氢离子的溶液中，并不断用氢气冲打到该铂片上，氢离子的活度 $a_{H^+}=1$，氢气在气相中的分压为 1.01325×10^5 Pa。产生在被铂黑吸附的氢气与溶液中氢离子之间的电位，称为标准氢电极的电极电位。国际上规定标准氢电极的电位在所有温度下其值为零。它用作电极电位的基准，由标准氢电极和其他处于标准状况下的电极组成电池，则可测定其他电极的标准电极电位。



标准曲线 calibration curve 又称校正曲线（calibration curve），工作曲线（working curve）。大多数仪器分析方法都是相对的测量方法，仪器所记录的分析信号随试样的性质与实验条件而变化，在实际分析中需用已知浓度或含量的标准系列在相同的实验条件下制作的分析信号响应值随浓度或含量的变化曲线——标准曲线作为比较标准，根据测得的未知样品信号值求得其中被测定组分的浓度（含量）。例如，分光光度计记录的是吸光度 A 与试样溶液中分析物浓度 c 的关系曲线，通常为一直线。再按同样分析方法在相同条件下测定未知试样的吸光度，由所测得的吸光度从标准曲线查得（或由回归方程计算得）被测物质在试样中的浓度。标准曲线是依据回归分析的原理绘制的，不能随意将曲线外延，只允许根据它内插求值。它可用一线性回归方程表示。

标准溶液 standard solution 用于物质本身或其他物质测定时的已知准确浓度的溶液。例如，在容量滴定法中，常用某物质的标准溶液来滴定另一物质的溶液，根据用去标准溶液的体积即可计算被滴定物质的含量；在仪器分析法中，要测定某物质，亦需先用这种物质的标准溶液制作工作曲线（测量信号与浓度的关系曲线）。标准溶液可由直接法（由基准物质直接配制）或由标定法（由另一基

准物标定它的准确浓度）获得。

标准文件 normative document 为各种活动或其结果规定规则、导则或特性的文件。它包括标准、技术规范和法规等文件。

标准物质 reference material；RM 已确定其一种或几种特性量值，用于校准测量器具、评价测量方法或确定材料特性量值的物质。标准物质是国家计量部门颁布的一种计量标准，具有以下的基本属性：均匀性、稳定性和准确的定值。标准物质可以是纯的或混合的气体、液体或固体，也可以是一件制品或图像。按标准物质被定值的特性，分为物理或物理化学性质标准物质，如酸度、燃烧热、聚合物分子量等标准物质，具有良好的物理化学特性，用于物理化学计量器具的刻度、校准和计量方法的评价；化学成分标准物质，经准确测定具有确定的化学成分，主要用于成分分析仪器的校准和分析方法的评价；工程特性标准物质，如粒度、橡胶的类别等，用于技术参数和特性计量器具、计量方法的评价及材料与产品的技术参数的比较。我国根据标准物质的类别与应用领域分为 13 类。标准物质可以用来校准仪器仪表，评价测量方法，用作直接比对的标准、工作标准，质量保证系统中的质控样品，商业贸易中的计量仲裁依据，用于环境分析监测及生物医学临床化验等。

标准物质参考值 information value of reference material 用准确可靠的测量方法所确定的、只给出了平均值而未给出在一定置信水平的不确定度的标准物质的特性量值。这种特性量值对用户尚有参考价值，可以作为参考值使用，为避免混淆，在标准物质证书中必须有明确的说明。参见**保证值**条。

标准物质的稳定性 stability of reference material 在规定的条件下贮存的标准物质，在规定的时间隔内其特性量值保持在规定的限值范围内的能力。它是标准物质的基本特性之一。

标准物质的有效期 expiration date of reference material 是指在使用条件下保持标准物质特性量值的变化不超出标准物质定值不确定度的期限。标准物质的特性量值在使用过程中受物理、化学、生物等因素的影响而发生变化，用精密度较高的实验方法，测定标准物质的特性量值随时间的变化，以标准物质最初的特性量值为基准，若在不同时间间隔内测得的特性量值与基准值之差不超过在一定置信水平下标准物质定值的不确定度时，可认为标准物质在试验的时间间隔内是稳定的，仍可正常地使用。

标准物质定值 certification of reference material 为确定标准物质的特性量值及其不确定度的全部操作。量值准确是标准物质的基本属性之一，是进行量值传递的基础。标准物质经均匀性检验合格后方可进行定值，定值通常有三种方式：（1）在一个实验室采用一个权威方法定值，要求由两个或两个以上的分析者独立进行操作，最好使用不同的实验装置；（2）在一个实验室采用两种或两种以上不

同原理的准确可靠的分析方法定值；(3) 由多个（6～15个）具有同等能力的实验室采用一种或多种准确可靠的分析方法协作定值。定值的结果以平均值及其在一定置信水平的不确定度表示，作为标准物质的保证值给出。对某一个或几个特性量值只给出其平均值，而没有给出其不确定度，但对用户尚有参考价值，可作为参考值给出；若某个或某些值可靠性更差，可作为信息值发布，但在标准物质证书中必须有明确的说明。

标准物质均匀性 homogeneity of reference material 以相同的结构或成分存在，并具有一种或多种性能的物料的一种状态。对具有一定规格的样品，不论它是否取自同一包装（包、瓶），其被测定的特性值都落在规定的不确定度范围内。均匀性是标准物质的基本属性之一，是保证标准物质特性量值一致的基础，也是进行定值和稳定性检验的前提。

标准物质均匀性检验 homogeneity test of reference material 从标准物质中随机抽取有代表性的样品，选择精密度较高的实验方法，由同一操作人员在一致的仪器和实验条件下，对标准物质不易均匀的和有代表性的特性量进行测定，并选择合适的统计模式对测定结果进行统计检验，以确定标准物质是否均匀的操作。当标准物质特性量值的变动性相对于所采用的实验方法的测量误差可以忽略不计时，或者相对于标准物质的使用要求，在规定的允许误差之内，可以认为标准物质是均匀的；当物质不均匀性所引起的误差与测量误差的大小相近时，应将不均匀性所引起的误差作为标准物质不确定度的一个组成部分，计入标准物质的总不确定度中。抽取样品的单元数与每个样品重复测量次数应符合统计检验的要求，当总体单元数 N 少于500时，抽取样品数为15～25个，总体单元数 N 大于500时，抽取样品数为 $3\sqrt[3]{N}$ 个。每个样品重复测定次数一般不少于2次。均匀性检验，应注明保证均匀性的最小取样量。

标准物质稳定性检验 stability test of reference material 从在规定的保存条件下保存的标准物质中随机抽取一定数量的样品，选择精密度较高的实验方法，对标准物质易变的和有代表性的特性量进行测定，以标准物质最初的特性量值为基准，考察标准物质的特性量值随时间的变化，并选择合适的统计模式对测定结果进行统计检验，以确定标准物质的特性量值是否稳定的操作。稳定性是标准物质的基本特性之一，是指在一定条件下标准物质保持其特性量值的持续性。当在不同时间间隔内测得的特性量值与基准值之差不超过标准物质的不确定度时，可认为在试验的时间间隔内标准物质是稳定的。稳定性检验的目的是确定标准物质的保存期或有效期。保存期是指在所规定的保存条件下标准物质的稳定期限，有效期是指在使用条件下标准物质的有效使用期限。对于气体化学成分标准物质，除了检验

其时间稳定性之外，还要检验压力稳定性，以确定压力变化对化学成分的影响。当标准物质的稳定性出现问题时，标准物质的研制和发行单位应及时通知用户。

标准系列法 standard series method 通过与一系列标准溶液进行比较，实现样品浓度测定的一种目视比色法。操作时将样品溶液与一系列已知浓度的标准溶液按同样操作方式在材质相同、直径均匀、体积一定的比色管中配制成一定体积的溶液，在装有反射镜的试管架上比较颜色的深浅（从管口向下注视），若样品溶液颜色与某标准溶液管的颜色接近，则样品溶液的浓度则与该标准溶液管的浓度相近。

标准正态分布 standard normal distribution 均值 $\mu=0$、方差 $\sigma^2=1$ 的正态分布，记为 $N(0,1)$。标准正态分布概率密度函数为

$$\varphi(u)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)$$

正态分布变量 x 经过 $u=\frac{x-\mu}{\sigma}$ 变换，可以变为标准正态分布。

表观电泳淌度 apparent electrophoretic mobility 在有电渗流存在下，离子的迁移速度是电泳和电渗流两个速度的矢量之和。表观电泳淌度为电渗流淌度和有效电泳淌度之和。

表观交换容量 apparent exchange capacity 一定条件下实测的交换容量。它不一定代表离子交换功能基的数量。当功能基未完全离解，或树脂孔径太小，离子不易扩散时，表观交换容量小于总交换容量；而当功能基离解比较完全，加上溶质离子在固定相表面同时存在吸附等其他相互作用时，可能会出现表观交换容量大于总交换容量的现象。

表观荧光光谱 apparent fluorescence spectra 由于荧光测量仪器的特性，例如光源的能量分布、单色器的衍射和检测器的响应等特性都随波长而变，所以一般荧光分光光度计上测得的荧光激发光谱和发射光谱都是表观荧光光谱，光谱中含有与光源、单色器以及检测器性能有关的属性。即使是同一物质，在不同荧光光谱仪上测得的光谱其最大波长、波形经常会有差别，因此需要对表观荧光光谱进行校正。在进行荧光物质荧光特性研究、与其他文献数据进行比较时需要使用校正荧光光谱。而在一般分析应用中，可以直接利用表观荧光光谱，以相对荧光强度来选择定量分析最适条件，实现定量分析。

表面电离 surface ionization；SI 又称为热电离（thermal ionization；TI）。原子或分子与固体表面相互作用实现的离子化。样品涂敷在金属表面，当加热金属表面时样品受热蒸发，蒸发出的原子（或分子）大部分飞离金属表面，一部分返回并撞击热金属表面放出（或吸收）电子而形成离子即表面电离，一部分由热激发形成的离子即热电离。离子化效率与表面材料的功函数、表面温度及样品的电离能有关。

表面电位 surface potential 把单位电荷从物体外表面附近的一点移到物体相内所做的电功，由于其涉及化学作用，不能直接测量，是一种目前尚无法测定的量。

表面电位检测器 surface potential detector 一种用于气相色谱的检测器。其工作原理是：由两种不同金属片组成电容器的两极，将一个电极固定，另一电极与机械振动器相连，使之按固定频率振动，于是形成一振荡电容器。用导线将电容器两极与直流电源连接，当流过电容器的载气中出现样品组分时，所输出的电流即发生变化而输出信号。

表面多孔硅胶 superficially porous silica gel 又称薄壳型硅胶。内部为实心，仅在表面层具有良好多孔性的硅胶颗粒。通常是以直径 30～40μm 的球形玻璃实心核为基料，在其表面粘结上数百纳米粒径的硅胶（或氧化铝）细粉，然后在高温下烧结，使硅胶颗粒表面形成一层仅仅 1～3μm 厚的薄层。

表面多孔填料 superficially porous packing material 在实心玻璃微珠（20～50μm）的表面包覆一层约 1μm 厚的极细微粒硅胶（0.01～0.2μm）作基质的填料。固定相的功能分子是通过化学或机械方法结合在包覆层的微细颗粒表面。这种填料因表面积大而具有很高的分离效率。

表面多孔型离子交换剂 superficially porous ion-exchanger 以物理或化学的方法在惰性核的表面覆盖一层极细的离子交换树脂颗粒而制成的一种薄壳型离子色谱填料。在核外的细粒树脂上又可以通过化学方法或机械方法结合上一层离子交换功能分子。常用的附聚型阴离子交换树脂就属这种类型，它的惰性核为上述表面磺化薄壳型阳离子交换树脂，核外是由许多 0.05～0.4μm 粒径的阴离子交换树脂胶乳组成的功能薄层。

表面分析 surface analysis 利用电子束、离子束、光子束、中性粒子束等作为探针，有时加上电场、磁场、热和机械的作用，来探测处于真空或超高真空中的样品表面，研究其表面形貌、元素的化学组分、原子结构、原子态、电子态等信息。这些表面分析的表面取样深度一般在 0.1～5nm 之间，是原子级水平的表面分析，因此，其分析结果与体相结果相比会有很大的差异。常用的表面分析方法有 X 射线光电子能谱，俄歇电子能谱，二次离子质谱等。

表面和微区分析技术 surface and microarea analysis technology 主要用于表面污染、气体吸附、催化机理、表层扩散等的研究，可提供 $1\mu m^3$ 以内的微区组分的信息。主要方法有电子探针、光电子能谱、俄歇电子能谱、二次离子质谱、激光微探针质谱。近年来广泛应用的电子显微镜和扫描隧道显微镜是这方面的新技术。

表面化学位移 surface chemical shift; SCS 金属表面原子与芯层能级结合能的不同，与表面效应有关。随金属表面结晶学、价电子组态、表

面内聚能以及偏析热的不同，表面能级的位移可以在一定范围内变化，可解释为表面带结构的变化。一般说来，金属表面原子配位数的降低可使 s、p 及 d 导带变窄，其间的杂化度下降，即价带更趋于类原子的性质。每个表面原子的平均总电荷与体相的相同，因此每个键的电子密度提高了。对费米能级处或附近只有一个带的金属来说，表面上电荷分布变化不大。如果单带为半满层以下的金属，其电子具有成键性质，因此表面原子电荷增加，导致芯层结合能增大。如果单带为半满层以上，则处于反键性质，则芯层结合能又趋降低。表面结合能位移对电荷再分布以及化学吸附很敏感，因此可以提供很多细节信息。

表面结构表征 characterization of surface structure 利用表面分析的方法研究固体表面的形貌、原子结构（即原子排列）、原子态（即原子运动和价态）、电子态（又称电子结构）等信息。所有的信息都是在表面原子层水平级的，与体相会有很大差别。常用的表征方法有：X 射线光电子能谱，俄歇光电子能谱，二次离子质谱，扫描隧道显微镜，原子力显微镜，低能电子衍射等。

表面态分析 surface state analysis 固体样品的表面电子状态与体相状态是有差别的，该表面电子状态主要是由固体材料的价带结构所决定的。利用真空紫外光电子谱及 X 射线光电子能谱的价带谱可以获得固体材料的电子态密度分布等信息。这种对样品表面的电子能态进行分析的方法叫表面态分析。

表面污染 surface contamination 在用表面分析仪器（如电子能谱、电子显微镜）对样品进行分析时，当电子束照射样品表面时，因电子束与样品表面或其附近的有机物相互作用而导致样品表面产生的污染。其成分以有机碳为主，且污染层随时间的增加而增厚，经常会对表面的成分检测造成干扰。通常可以采用提高仪器真空度、在样品附近或整个仪器内部用液氮冷却等方法来减少污染。对于电子能谱分析，表面污染则是指由于分析的表面灵敏度很高，可以检测到千分之一的原子层，因此当真空室的真空度差时，真空中的残留有机物、水汽等可以沉积在样品表面产生表面污染，使得分析的结果受到严重影响。一般应该及时分析或提高真空度。

表面效应 sheilding effect X 射线荧光光谱分析中的一种基体效应。样品的表面状态和荧光谱线强度的关系在元素定量测定中是一个不可忽视的影响因素。荧光谱线的强度不仅和样品表面的织构和纹沟的性质有关，而且也和样品的放置方位有关。对于后者，可以通过在测量过程中转动样品来减少或消除这种影响。一般粗糙的表面经常引起谱线强度的损失，表面光洁度越差，强度的损失就越大；而且谱线强度的损失与谱线的波长有关，波长越短，谱线强度受表面光洁度的影响就越小。

表面诱导解离 surface-induced dissociation; SID 质谱法的一种离子活化方式。以固体表面作为碰撞靶，被加速的离子与靶表面碰撞发生解离，裂解的程度与碰撞能量和靶的种类有关。与在离子活化区引入碰撞气体使离子和气体分子发生碰撞活化解离相比，采用表面诱导解离时，传递给离子的能量是限定的、且能量分布较窄，易于控制转化的内能。

表面增强共振拉曼散射 surface enhanced resonance Raman scattering; SERRS 当具有共振拉曼效应的分子被吸附在粗糙化的银或金等金属表面时，其共振拉曼信号能增强 $10^2 \sim 10^3$ 倍。这种现象称为表面增强共振拉曼效应，简称为 SERRS，所得到的光谱即为表面增强共振拉曼光谱。SERRS 既有淬灭荧光、消除荧光干扰的作用，也有表面增强的效应，是获得高质量拉曼光谱的有效途径。

表面增强拉曼散射 surface enhanced Raman scattering; SERS 一般拉曼光谱的灵敏度较低，但当一些分子被吸附到某些粗糙的金属，如金、银的表面时，它们的拉曼信号会增强 $10^4 \sim 10^7$ 倍。这种不寻常的拉曼散射增强现象被称为表面增强拉曼散射效应，简称 SERS，所得的光谱即为表面增强拉曼光谱。近年来，一些研究组在纳米颗粒银上测得了单分子的表面增强拉曼光谱，增强因子高达 $10^{14} \sim 10^{15}$。表面增强拉曼光谱被认为是一种很好的表面研究技术。

表面蒸金 gold evaporation 在进行扫描电镜或电子探针分析时，为了消除或减少高能电子扫描非导体样品时在样品表面产生的充电现象，在样品表面喷镀一层金属金作为表面导电层。为了消除荷电效应以及不影响样品的表面形貌，蒸金层应该具有一定的厚度，但也不能太厚。对于高分辨扫描电镜，为了不影响空间分辨率以及对样品细微结构的观察，应该控制表面蒸金层的金颗粒大小，或者可以通过蒸碳或蒸镍来减小导电层的颗粒大小对形貌的影响。

表面蒸碳 carbon evaporation 在进行扫描电镜或电子探针分析时，为了消除或减少高能电子扫描非导体样品时产生的充电现象，在样品表面喷镀一层有石墨结构的导电层。与表面蒸金相比，表面蒸碳的颗粒较小，对样品表面形貌的影响较小，但其导电性不如表面蒸金好。

别构控制 allosteric control 是指通过与蛋白质分子的某一部位起作用而引起蛋白质构象变化，进而影响蛋白质分子另一部位活性的一种控制机理。

并合标准偏差 pooled standard deviation 并合方差的平方根值。并合方差是按加权方式计算出的各组测定值方差的统计平均值。当试验分 m 组进行，总的测定方差 S^2 由 m 组的方差 $S_i^2 (i=1,2,\cdots,m)$ 共同决定。总方差

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{m} f_i S_i^2}{\sum_{i=1}^{m} f_i} = \frac{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij} - \bar{x}_i)}{\sum_{i=1}^{m}(n_i - 1)}$$

式中，n_i 和 $f_i = n_i - 1$ 分别为第 i 组的测定次数和自由度。

波长 wavelength 沿光波传播方向测量相邻波上同位相的两点之间的线性距离，符号为 λ。为方便起见，通常在波图的极大值（波峰）或极小值（波谷）处进行测量。其单位在紫外-可见区用纳米（nm），在红外区用微米（μm）。波长 λ 或频率 ν 由产生跃迁的两能级的能量差 ΔE 决定

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

式中，c 是光速（$cm \cdot s^{-1}$）；h 是普朗克常数。能量差 ΔE 取决于原子和分子的结构，是原子和分子的固有特性。原子光谱波长是进行原子光谱定性分析的依据。

波长分辨率 wavelength resolution 指单色器区别或辨认两条波长差为 $\Delta\lambda$ 的相邻光谱线的能力，是所有光学仪器的一项重要质量指标。理论分辨率由下式定义，$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$，λ 为这两条谱线波长的平均值。此式表示单色器刚刚能把波长为 λ 及（$\lambda + \Delta\lambda$）的两条谱线分开。所谓“刚能分辨开”的判据是瑞利（Rayleigh）判则：一条谱线之衍射花样的中央极大值正好与相邻等强度谱线衍射花样的第一极小值相重合。显然，被分开的两条谱线的波长差（$\Delta\lambda$）愈小，则该单色器的分辨能力愈高。若要得到高的波长分辨力，单色器的色散力要好，测试时所用狭缝要窄。实际工作中，对不同仪器的波长分辨率表示各异。例如，对 X 射线分光计，其波长分辨率用公式 $\frac{tg\theta}{B}$ 算出，式中，θ 为衍射峰的布拉格角；B 为衍射峰的半高宽。

波长精度和波长重现性 wavelength accuracy and wavelength reproducibility 在单色仪、分光光度计等光谱仪器中，需随时改变仪器输出单色光束的波长值、或进行自动波长选择、自动波长扫描。仪器标示出的波长值与仪器输出单色光真实波长值之间的偏差值（波长误差）大小表征了仪器的波长精度，仪器的波长精度是直接与光谱定性分析准确度相关的重要仪器性能指标。波长精度决定于仪器波长机构的机械精度及光学系统调整精度，环境温度的变化对波长精度也有影响。波长重现性表征多次改变波长时对同一波长多次标示值之间的最大偏差，这是直接反映仪器波长系统工作稳定性和可靠性的指标。波长重现性是随机误差的反映，与仪器机械系统、电子系统稳定性及电子噪声、外来杂散光、温度变化等因素直接相关。

波长色散 wavelength dispersion 在扫描电镜的能谱分析和电子探针分析中，对电子束激发产生的 X 射线能量进行分析的一种方法。该方法利用高能电子束扫描样品表面，产生 X 射线。由于每个元素均可以产生特征 X 射线，分析 X 射线的能量（波长）就可以对样品进行定性检测。在对 X

射线的能量分析时，通过 X 射线经分光晶体产生衍射，从而在空间产生按波长不同的色散分布，就称为波长色散，也叫晶体色散。从色散的波长就可以获得 X 射线的能量，从而判断分析区域的元素组成。从色散波长的强度可以对元素进行定量分析。

波长色散 X 射线荧光光度计 wavelength dispersive X-ray fluorescence spectrometry 一种 X 射线荧光光谱仪。由样品发射的 X 射线荧光在进入检测器之前，经过色散元件使之按其波长进行空间色散，从而使检测器一次只接受一种波长的荧光。对于短波长的 X 射线荧光（10pm ~ 2nm），一般采用各种无机或有机晶体作为色散元件；而对于长波长的 X 射线荧光（2 ~ 20nm），则主要采用光栅或全反射的镜面反射器作为色散元件。根据检测通道的配置，这类光谱仪又有单道和多道之分。在单道光谱仪中，通过色散元件或检测器的扫描，可依次检出和测定待测元素的特征谱线及其强度。在多道光谱仪中，则是利用多个固定的检测通道对特定元素的特征谱线同时进行测定。为了增加多道光谱仪的灵活性，有时多道谱仪中也包含一个扫描通道。

波长色散分析法 wavelength dispersion analysis 扫描电镜以及电子探针分析中需要对电子束产生的 X 射线的能量进行分析。一般可以通过分光晶体使 X 射线按波长色散，再用探测器将其转化为电信号进行检测，这样就可以获得电子束激发的 X 射线的波谱分析图，从波长可以判断 X 射线的能量，从而可以获得元素组成的定性和定量分析。

波长色散谱仪 wavelength dispersive spectrometer; WDS 采用波长色散法来检测聚焦电子束产生的 X 射线谱的仪器。当前的 X 射线显微分析仪，大多采用波长色散谱仪来进行 X 射线的能量分析。波长色散仪的灵敏度不如电子能谱高，但能量分辨率较好，目前主要用在扫描电镜和电子微束探针分析上。

波导管 waveguide 波导管是传输微波的金属管，截面多呈矩形，一般为铜制并内壁镀银。在 ESR 谱仪中，由微波桥发出的微波通过矩形波导管进入谐振腔（样品腔）。波导管的尺寸根据微波波段的不同而不同。对于常见的 X 波段 ESR 谱仪，其微波波长是 3cm 左右，相应的矩形波导管的一种标准尺寸是：内壁宽边的长度 $a = 22.86$mm，内壁窄边的长度 $b = 10.16$mm，a 稍大于 b 的 2 倍。

波高 wave height 电化学中的波高是指极谱波的极限电流，可以使用任何方便的单位。在极谱定量分析时常用它。

波数 wave number 电磁波在单位距离内振动的次数，单位是 cm^{-1}。波数 σ 与波长 λ、频率 ν 及光速 c 之间的关系是

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

电磁波的能量与频率、波数成正比。

玻尔磁子 Bohr magneton 是电子

磁矩的量子力学单位。电子的电荷为 $-e$、质量为 m_e，真空中的光速为 c，普朗克常数为 h，$\hbar=\frac{h}{2\pi}$，玻尔磁子 μ_B（也用 β 表示）则为

$$\mu_B=\frac{\mu_0 e\hbar}{2m_e}=0.9274096\times10^{-23}\mathrm{J}\cdot\mathrm{T}^{-1}$$

玻璃电极 glass electrodes 由一种特殊类型的玻璃制成球泡状的敏感膜，球内盛有内充液和内参比电极，响应于特定的离子，如 Li^+，Na^+，K^+，Ag^+ 和 NH_4^+ 的敏感玻璃电极。由于膜电位随被测离子活度而变化，因而通过离子选择性膜的膜电位可测定离子的活度。

玻璃 pH 电极的碱误差 alkaline-error of glass pH electrode 使用玻璃 pH 电极测定碱性太大溶液的 pH 值时，由于溶液中 H^+ 浓度太小，除氢离子以外的其他阳离子在溶液和玻璃 pH 电极膜界面间进行交换形成相应电位而使 pH 测量值偏低，所产生的误差称为"碱差"。由于 Na^+ 的干扰尤较显著，又称为"钠差"。质量良好的玻璃 pH 电极（主要决定于玻璃膜的组成）仅在 $pH>13$ 时才产生碱差。

玻璃 pH 电极的酸误差 acid-error glass pH electrode 使用玻璃 pH 电极测定酸性太大溶液的 pH 值时（如 $pH<1$），由于溶液中 H^+ 浓度太大，测得 pH 值将高于实际值，由此产生的误差称玻璃 pH 电极的酸误差，产生的原因尚不完全清楚。

玻璃化转变温度 glass transition temperature 过冷液体和无定形玻璃态之间发生转变时的温度，以 T_g 表示。通常无机物、有机物、高聚物和合金等材料在急冷的条件下可见到这种玻璃化转变现象。

玻璃膜电极 glass membrane electrode 利用特殊玻璃制成的膜作传感器，实现对某种离子的活（浓）度或其改变具有选择性响应的电极，属离子选择性电极的一种，pH 玻璃电极就是一种应用最广泛的玻璃膜电极。通过改变玻璃膜的组成，还可以实现对其他某些离子的活（浓）度或其改变具有选择性响应的电极，如 Na^+、K^+ 和 Li^+ 选择性电极等，目前应用较广的是 Na^+ 选择性电极。

玻璃球载体 glass beads support 属非硅藻土类型载体。主要是为避免吸附而采用这种载体。它的比表面较小，经过粗化后可达 $0.01\sim0.1m^2\cdot g^{-1}$，因此固定液的载量很小，进样量也必须随之降低。其特点是由于载液量小（最低可适 0.05%），在分离高沸点物质时馏出的温度会降低（例如沸点 500℃ 的物质可在 275℃ 流出），馏出的时间也会缩短。

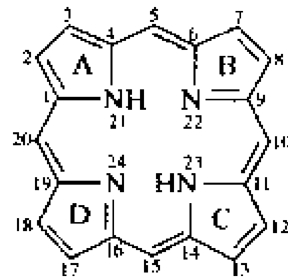
玻璃状溶剂 rigid glass solvent; glassy solvent 常指低温磷光中用于溶解样品的溶剂。由于这种溶剂在液氮温度（77K）下呈玻璃状，因此称为玻璃状溶剂或刚性溶剂。这种溶剂在极低温度下对待测分子也有较好的溶解性，本身不发光，与待测分子无相互作用，并且澄清透明而没有气

泡。常用的玻璃状溶剂有 EPA（乙醚、异丙烷与乙醇的 5: 5: 2 的混合溶剂）、EP（乙醚与异丙烷的等体积混合溶剂）以及 PM（异丙烷与甲基环己烷的 1: 4 至 6: 4 的混合溶剂）等。

铂电极 platinum electrode 以金属铂片或铂丝为基体材料的电极。它是一种惰性金属电极，铂本身不参加电极反应，但能传导电流。由于铂具有化学性质稳定，氢过电位小，而且高纯度的铂容易得到，容易进行加工等特点，所以是实验室中最常用的一种电极材料。

博士试验 doctor test 在升华硫存在下，用亚铅酸钠溶液和轻质石油产品作用，以定性检查油中硫醇或硫化氢存在与否的试验。所使用的亚铅酸钠溶液称为博士试剂。博士试剂是用乙酸铅溶液与氢氧化钠溶液配制而成。过氧化物的存在会干扰试验。

卟啉 porphyrin 卟啉分子是由四个吡咯环（A ~ D）经四个次甲基—CH ═(5,10,15,20)连接闭环而构成的衍生物，如右图所示。其侧基上(2,3,7,8,12,13,17,18)接甲基、乙基、乙烯基、丙酸基等取代基后生成各类卟啉分子。卟啉环是一个大的平面共轭结构，四个吡咯环结构相同（双键位置任意）。卟啉的物理化学性质由侧基上取代基的种类决定。具有羧酸取代基的卟啉由于吡咯环上 N 原子的弱碱性而显示两性电解质的特性。羧酸基越多，亲水性越强，不易被醚类等有机溶剂萃取；反之，羧酸基越少，疏水性越强，容易被醚类萃取。只有用较强的无机酸才能从醚中反萃取出来。一般将用等量盐酸从乙醚中萃取 2/3 卟啉时需要的盐酸浓度（%）定义为盐酸数。羧酸基少的卟啉容易在醚中溶解，盐酸数大，卟啉的甲基酯也比相应的游离卟啉盐酸数值大。卟啉一般呈红色，具有特征紫外-可见吸收光谱及荧光光谱。其有机溶剂溶液在可见区有四个特征吸收峰，Soret 带在 400nm 附近有一个吸收峰。



补偿光谱 compensated spectra 一般指在参比光路中放置某种物质以补偿样品光路中不需要的吸收或光能损失后测得的光谱。最常见的情况是对入射光 I_0 的补偿。由于窗片的散射、反射和偏振附件的安装等都可造成 I_0 的降低，可在参比光路中放置光束衰减器或金属纱网，以挡掉一部分光，再调节 I_0 至满度（100%）。补偿光谱的另一种情况是对溶剂吸收的补偿。此时，样品溶液置于样品光路，溶剂置于参比光路，测得的即是样品溶液中所含少量溶质的吸收光谱。补偿光谱可使重叠谱带分开，能显著提高测量的灵敏度。主要应用于大量已知物质存在下微量组分的分析，纯度鉴定，以及测定溶剂效应等所引起的微小波长（频数）移动等。

补体 complement 一组具有酶活性的血清蛋白质，与抗体结合使细菌或其他细胞溶解。补体的成分有：$C_1 \sim C_9$，B因子，D因子，H因子，I因子，备解素，C_1抑制因子和C_4结合蛋白等。C_1的活化可引起其他成分的连续数学性活化。补体成分介导的生物学效应有：细胞免疫，体液免疫，溶菌，趋化性，溶血，调理作用和过敏毒素产生等。

补体结合试验 complement-fixation test；CFT 为了说明样品中存在特定抗原或特异性的补体结合抗体，定性和定量地检测补体结合的任何血清学试验。即把固定数量的抗原和补体分别加到一系列失活血清的连续稀释液中，可以定量特异的血清抗体。温育后，再加入溶血系统，检查每一种血清稀释液是否存在游离补体。在阳性试验中，抗体的滴度可以由出现一定程度溶血的血清稀释液表示。补体未被结合的血清稀释液，则不含有可测的抗体。如果在最低稀释度的血清中，观察到溶血作用，则试验是阴性的，即原始血清不含有可测的抗体。为消除因存在抗补体物质等的影响，必须作对照试验。

不重复抽样 sampling without replacement 亦称不放回式抽样，每次从样品总体中抽取的样品单位，经检验之后不再放回总体内，在下次抽样时不再被抽到。总体每经过一次抽样，其中的样品单位数就减少一次，因此，每个样品单位在各次抽样时被抽中的概率是不同的。

不等精度测量 unequally accurate measurement 各次测量值具有不同精度的测量。用不同的方法对同一样品的测定，不同人员用相同的方法对同一样品的测定、同一分析人员用相同的方法对同一样品在长时间间隔进行的测定，得到的测量值常常是不等精度的，应按加权方式计算总方差。

不对称单位 asymmetric unit 晶胞中没有对称性联系的原子、离子或分子所占据的区域。一个不对称单位可以看做是晶体空间中的一部分，由这部分出发，利用晶体所属空间群的全部对称操作，可以准确地恢复整个晶体空间。一个不对称单位的结构参数包括了描述整个晶体结构所需要的全部信息。不对称单位的划分不是惟一的，例如，对于分子晶体常选择有利于表达分子结构的区域作为不对称单位。

不对称电势 asymmetry potential 根据膜电势公式，膜两侧溶液主要离子的活度相等，膜电势应为零。实际上，用相同电势的内、外参比电极，相同活度及其组成的内、外溶液、测得的电动势值并不为零，一般在$-1.8 \sim 4.2mV$范围波动，称为不对称电势。不对称电势的存在，是pH测量误差的来源之一。而且对于同一玻璃电极，它的数值往往随时间而变化。消除的方法是，玻璃电极在使用前要充分浸泡，测量时用已知pH值的标准缓冲溶液进行校正。

不对称电位 asymmetry potential 在pH玻璃电极的膜电位与溶液pH值的关系式推导过程中，曾作过关于

玻璃膜内、外溶胀层中的氢离子活度相等的假定，因而跨越整个玻璃膜的膜电位仅随玻璃电极内、外溶液中的氢离子活度差而定。但实际上当外部溶液的氢离子活度与内参溶液的氢离子活度相等时，玻璃膜的电位并不等于零，即玻璃膜两侧仍有一定的电位差，这种电位差称为玻璃电极的不对称电位。它主要因玻璃膜内、外两个表面实际上的差异而产生。pH 玻璃电极在使用前经长时间浸泡活化，可减小、稳定不对称电位，从而可合并到电极常数中，基本不影响以后的测定。

不分流进样 splitless sampling 指在色谱分离中，将全部被分析样品引入毛细管色谱柱进行分离分析的一种进样方法。在进样时，把分流系统的分流阀关闭（一段时间），使所有样品在汽化室内汽化为气体后，被载气带入毛细管色谱柱，然后再开启分流阀吹走少量剩余的未进入毛细管柱的样品混合气体。它的优点是灵敏度高，适用于痕量分析，如环境分析、食品中残留农药分析、药物筛选等。需注意下面两点：（1）进样器温度要足够高；（2）样品预处理或稀释时所用溶剂要与样品的极性相匹配。

不极化电极 nonpolarizable electrode 又称去极化电极。电极面积很大，电解时电流密度很小，不易出现浓差极化，电极电位是恒定的。

不可控因素 uncontrollable factor 其水平不可人为地严格加以调控的、无法通过试验选择出其最佳水平的因素。如农业试验，土质和肥力、日照条件等很难人为控制，在分析测试中，仪器性能、人员素质等也都难于严格控制。因此，在设计试验时，要尽量将不可控因素做随机化安排，使其影响相互抵偿。

不可逆极谱波 irreversible polarographic wave 极谱电流是受电极反应速率控制的极谱波。其特征是当电极电位达到去极化剂的还原电位以后，电流随电位负移而缓慢上升，最后虽也达到极限扩散电流值，但由于电极反应进行缓慢，极谱波上升部分是倾斜的。

不灵敏核的极化转移增强法 insensitive nuclear enhanced by polarization transfer; INEPT 一种利用极化转移技术区分指认 CH_3、CH_2、CH 与 $>C<$ 基团的方法。该法的脉冲序列如下

$$^{13}\text{C 观测核}\left[\text{———————}\ \pi_y - \frac{1}{4J_{CH}} -\right]\left(\frac{\pi}{2}\right)_x \text{—— AQ（采集 FID）}$$

$$^{1}\text{H 辐照核}\left[\left(\frac{\pi}{2}\right)_x - \frac{1}{4J_{CH}} - \pi_y - \frac{1}{4J_{CH}} - \left(\frac{\pi}{2}\right)_{\pm y}\right] \text{- 全去耦}$$

上述两个［ ］内的脉冲序列起到选择性激发，使^{1}H 有关能级的布居数反转，产生极化转移，为检测因极化转移而增强的^{13}C 的信号，经 90° 作用后变成仪器可检测的信号，经过不同的 τ 时间间隔 $\frac{1}{4J_{CH}}$，$\frac{2}{4J_{CH}}$，$\frac{3}{4J_{CH}}$，由于 CH、CH_2、CH_3 基团^{1}H 对^{13}C 的耦合裂

分的不同而分别可检测到 CH_2、CH、CH_3 同时出现正信号；只有 CH 为正信号；CH_2 为负信号和 CH、CH_3 为正信号的 3 种谱图。比较 3 种实验条件的谱图以及全去耦谱图可以方便地区别和指认分子中的 CH_3、CH_2、CH 与 ＞C＜ 基团。由于该方法利用选择性激发所导致的极化从丰核转移到稀核，从而大大增强了信号，因此而得名。

不确定度　uncertainty　表征合理地赋予被测量的量值的分散性。测得的量值及其不确定度给出了一个以一定的置信概率包含被测定量的真值的置信区间。包括根据测量数据统计分布估计的 A 类不确定度(即随机不确定度,用标准偏差表征)和由系统效应引入的 B 类不确定度(即系统不确定度，与修正值和计量标准有关联)，按照误差传递公式,可将两类不确定度合成,此称为合成不确定度。合成不确定度具有概率意义,在遵从正态分布的条件下,其概率为 68.27%。合成不确定度乘置信系数 k,所得到的不确定度,称为展伸不确定度,即总不确定度。k 值一般取 2～3,即区间所需包含概率或置信水平为 95.44%～99.73%。总不确定度表示测定结果的置信区间,被测量的值分布有 95.44%～99.73% 包含在此区间内。用来评定和表达由于测量误差的存在而导致被测定量的量值不确定的程度。

不完全去耦　non-complete decoupling　见偏共振去耦条。

不稳定常数　instability constant　另一种表征配（络）合物的稳定性的特征参数，常用 $K_{不稳}$ 表示。与配（络）合物的稳定常数 $K_{稳}$ 互成倒数关系，$K_{稳}=1/K_{不稳}$。例如



$$[Ag(NH_3)_2]^+ \rightleftharpoons Ag^+ + 2NH_3$$

$$K_{不稳}=\frac{[Ag^+][NH_3]^2}{[Ag(NH_3)_2^+]}$$

对具有相同配体数的同类型配合物而言，$K_{不稳}$ 愈大，表示该配合物愈不稳定，愈易解离。

不稳定离子　unstable ion　在离子源内生成，但在离开离子源之前就分解的离子。通常指寿命小于 10^{-6}s 的离子。由于这种离子的裂解发生在离子源内，因此称为源内碎裂（in-source fragmentation）。

不允许残留　nontolerance　指由于某类农药的毒性较大或其他原因，不允许残留于食物的内部或表面，其允许残留量为“零”。

布居数　*population*　粒子在各能级上的分布几率。在热平衡下，体系的微观粒子处于不同的运动状态，在各相应的能级上的占有的几率（分布几率）是一定的，体系微观粒子的布居数服从波耳兹曼分布。对于核自旋体系总数为 n 的能级中，处于能级为 E_i 的第 i 能级上的布居数 P_i 应为

$$P_i=\frac{\exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right)}{\sum_{i=1}^{n}\exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right)}$$

在恒定的静外磁场 B_0 中，核自旋量子数为 I 的核自旋系统在第 i 个塞曼能级上的 E_i 为

$$E_i = -\hbar\gamma B_0 m_I$$

其布居数为

$$P_i = \frac{\exp\left(\frac{-\hbar\gamma B_0 m_I}{kT}\right)}{\sum_{i=1}^{2I+1}\exp\left(\frac{-\hbar\gamma B_0 m_I}{kT}\right)}$$

γ 和 m_I 分别是核的磁旋比和自旋磁量子数。

布拉格方程 Bragg equation 联系衍射方向和晶胞大小、形状的方程之一，其形式如下

$$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$

式中，d_{hkl} 是衍射面间距；hkl 为衍射指标，它们是一组不一定互质的整数；λ 是入射和衍射 X 射线的波长。布拉格方程和劳埃方程实质上是一样的，都是联系衍射方向和晶胞大小、形状的方程，不同点是布拉格方程以平面点阵为出发点，劳埃方程以直线点阵为出发点，布拉格方程的应用更广泛。

布拉维格子 Bravais lattice 按照法国学者 A. Bravais 提出的准则，为晶体点阵选取平行六面体单位格子（晶胞）后，对晶体点阵所作的分类。这些准则是：（1）单位格子要显示出空间点阵所固有的点群对称性，并在其中表现出特征平移对称性；（2）尽可能取点群中的高次轴作为单位格子棱边的方向；（3）单位格子的棱边尽可能以直角相交；（4）在满足前几条的前提下，单位格子的体积尽可能小。一般用 P 表示简单格子，也称素格子，素格子的每个晶胞中只含有一个点阵点。用 A、B、C 表示底心格子，I 表示体心格子、F 表示面心格子，R 表示菱面体格子。底心、体心和面心格子的每个晶胞中都含有一个以上的格子点，所以又称为复格子（R 若取六方晶胞也是复格子）。晶体点阵一共可以划分成 14 种不同类型的布拉维格子，其中有 7 种素格子，7 种复格子。各种布拉维格子的点群对称性分属于 7 种点群，分别是 7 种晶系中对称性最高的点群。

布里渊散射 Brillouin scattering 它为非弹性散射，是由声子或磁振子引起的散射光频率的位移。位移一般只有 1 ~ 2cm^{-1}，要用光学干涉的方法才能分辨。布里渊散射可以测定材料的力学性质，如弹性模量等。

布洛赫方程 Bloch equations 布洛赫（Bloch）在 1946 年首先用经典理论描述磁共振现象，并提出了一组方程，用来描述磁场中磁化强度矢量的动态行为。

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{M}_z}{\mathrm{d}t} = \gamma(\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{M})_z + \frac{\boldsymbol{M}_0 - \boldsymbol{M}_z}{T_1}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{M}_x}{\mathrm{d}t} = \gamma(\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{M})_x - \frac{\boldsymbol{M}_x}{T_2}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{M}_y}{\mathrm{d}t} = \gamma(\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{M})_y - \frac{\boldsymbol{M}_y}{T_2}$$

这里，T_1 称为自旋-晶格弛豫时间或纵向弛豫时间，T_2 称为自旋-自旋弛豫时间或横向弛豫时间。由上述方程可知，当在 z 方向上加上静磁场 $\boldsymbol{H}$，

则磁化强度在 z 方向的分量 M_z 到热平衡时应趋于热平衡值 M_0，而 M_x、M_y 趋于零。

部分激发 partial excitation 因为 ESR 跃迁频率跨度很大，有些金属化合物的 ESR 谱出峰范围可达数百毫特斯拉，即使微波脉冲足够短，其频率范围也不可能覆盖整个 ESR 谱。这时只有涉及到部分谱线的跃迁能够被激发，这就是部分激发。应注意自旋包的部分激发与整个非均匀增宽 ESR 谱线的部分激发是有所不同的。

C

裁剪激发 Tailored excitation NMR 谱来自核自旋系统对激发场的响应。同一核自旋系统对不同激发场将产生不同的 NMR 谱。在选择性激发或选择性去耦实验中，只希望激发场仅限于预定的几个频率位置或频段。如欲消除强溶剂峰，则希望溶剂峰不被激发等等。为产生这种特定要求的激发场，根据 FT 原理，可先把这种特定要求的激发按其频谱函数 $F(\omega)$ 经 FT 转变成时域的激发函数 $f(t)$，再用 $f(t)$ 来调制出一定规则的激发脉冲序列，它们往往由小角度强脉冲串构成。如此根据实验的需要制造出具有特定函数的激发方式，恰如裁剪做衣，故称为裁剪激发。

采样 sampling 按照一定的程序从全部被测试物中抽取分析测试所需试样的过程。所抽取的试样要能代表全部被测试物料的平均组成，且不被稀释和玷污。对于颗粒大小、组成不均匀的物料，如矿石、煤炭、土壤等，则需按一定的步骤进行采样：首先采集“粗样”，粗样量的多少取决于颗粒的大小和其均匀性，粗样经破碎、全部过筛、混合和缩分后才能制成分析试样。缩分时常采用圆锥四分法，每经一次缩分，试样缩减一半。然后再经破碎、全部过筛、混合和缩分，直到化验所需量为止。送化验室

的试样应贮存在合适的容器中，贴好标签，注明试样名称、来源、采样时间和采样人等。

采样点间隔 sampling point interval 用 FTIR 光谱仪测定干涉图时是按时间先后的顺序和等时间间隔密集地采集信号的强度，干涉图采用这些信号的数字化点表示。一个实测的干涉图只能采用有限个数据点来数字化。采样间隔愈小，采集的数据点愈多，所得到的干涉图与真实情况吻合愈好，否则会丢失一部分真实信息而使图形失真。按照信息理论，采样频率需遵循尼奎斯特（Nyquist）规则，也就是说任何简谐函数波形必须至少以其基频宽的二倍频率进行采样，这样所采集的数组才能真实地代表原来图形。采样间隔可以用氦氖激光余弦信号的半波长作为基准，才能保证采样的波数精度达 0.01cm^{-1}。如果在某个 He-Ne 激光干涉图的过零点处采样，相当于每隔 0.316496μm 取一个数据点；通常采用在每 2、4、8 个过零点处采集数据。对于高频波的红外谱图测试，采样间隔应小一些；对于低频波的情况，因光谱范围的波长大，采样间隔可大一些。

采样频率 acquisition frequency 又称取样速率。指单位时间内取样次数。见时域信号的采集条。

彩色饱和度 color saturability 是表征彩色的纯净度的参数。在可见光区域内，单一波长的各种色光（单色光）是最饱和的彩色；在彩色光中掺入白光，其彩色就不饱和；掺入白光越多、彩色饱和度越低。光源的彩色饱和度取决于其辐射光谱组成覆盖的波长范围大小，物体的彩色饱和度取决于其表面对各种波长入射光的选择性反射（或透射）能力的大小。

参比电极 reference electrode 用于观察、测量指示电极电位的电极。其特性是该电极在实验条件下始终保持固定的电位值。例如，电位法测定溶液 pH 值时，由 pH 玻璃电极作指示电极，饱和甘汞电极为参比电极组成电池。由于饱和甘汞电极的电极电位不随 pH 值而变化，故测得的电池的电动势仅与 pH 玻璃电极的电极电位，即仅与溶液 pH 值有关。对参比电极的要求是电位已知、恒定、重现、温度系数小、电流通过时极化电位及机械扰动的影响小等。最常用的参比电极有甘汞电极、银-氯化银电极、铊汞齐电极、Hg/Hg_2SO_4 和氧化还原参比电极等。例如，电位法测定溶液 pH 值时，由 pH 玻璃电极作指示电极，饱和甘汞电极为参比电极组成电池。由于饱和甘汞电极的电极电位不随 pH 值而变化，故测得的电池的电动势仅与 pH 玻璃电极的电极电位，即仅与溶液 pH 值有关。

参比谱线 reference spectral line 在 X 射线荧光光谱分析中，所用校准曲线纵坐标的值是分析谱线净强度与参比谱线强度的比值。在外参比方法中参比谱线是指参比试样中，与分析谱线波长相同的谱线。在内参比方法中参比谱线可改用内标线或 X 射线管靶的康普顿线。对于 X 射线荧

光光谱分析，参比样品对定量分析具有重要的作用，可以大幅度提高定量分析的准确度。

参比溶液 reference solution 又称空白溶液。分析测定中，在测量样品溶液的分析信号（如分光光度法中的吸光度 A）时，用作比较的溶液（或溶剂）。通常采用不含被测物质但其他组成与样品溶液相同的溶液（此时称试剂空白）作参比溶液。

参比柱 reference column 又称参考柱，在双气路气相色谱仪中作为参考或比较的一根色谱柱。在两支平行的气路上各置一根色谱柱、内装填有相同的固定相，其中一根作为分析柱，样品流入此柱中进行分离，另一根即为参比柱。参比柱的作用是对由于柱温、流速、组成及固定液流失等引起检测信号的变化而进行自动补偿，以便获得稳定的基线，尤其在程序升温和程序变流色谱中，更显出参比柱的作用。

参考范围 reference interval 特指健康的人群的解剖、生理、生化等各种数据的波动范围。确定正常参考范围。常使用的 95% 范围是取自 2.5% ~97.5% 的参考值范围，在正态分布的条件下，采用 $x \pm 2s$ 作为参考范围。

参考剂量 reference dose 在合理使用和监控条件下，环境中某一定水平农药的残留可能被人体所摄取或接触的剂量。参见**每日允许摄入量**条。

参数估计 parameter estimation 在随机变量分布函数已知，根据样本数据估计总体参数的值。包括点估计和区间估计，估计总体均值、总体方差，称为参数的点估计；估计值不正好等于待估参数的真值，而只是其近似值，其近似的程度通常以（估计值 ± 置信限）所构成的置信区间的形式表征，此称为参数的区间估计。置信区间指明了它包含待估参数真值的概率，参见**置信区间**条。

参数检验 parameter test 对参数平均值、方差进行的统计检验。先由测得的样本数据计算检验统计量，若计算的统计量值落入约定显著性水平 α 时的拒绝域内，说明被检参数之间在所约定的显著性水平 α 下在统计上有显著性差异；反之，若计算的统计量值落入约定显著性水平 α 时的接受区域内，说明被检参数之间在统计上没有显著性差异，是同一总体的参数估计值。

残差 residual 在回归分析中，测定值 y 与按回归方程预测的值 Y 的差值称为残差，记为 δ，$\delta = y - Y$。残差平方的加和，称为残差平方和，又称残余平方和，记为 $Q = \sum (y_i - Y_i)^2$。残余平方和与残余自由度 $f = n - m - 1$ 之比，称为残余方差，记为 S^2

$$S^2 = \frac{\sum (y_i - Y_i)^2}{n - m - 1}$$

式中，n 是建立回归方程的试验点的数目；m 是回归方程中自变量的数目；S^2 表示回归方程的精度。

残差图 residual plot 以残差 δ 为纵坐标、以任何其他指定的量为横坐

标的散点图。在分析测试中，常以自变量 x 为横坐标的残差图来检查回归曲线的异常试验点。残差 δ 遵从正态分布 $N(0,\sigma^2)$。$\delta^* = \frac{\delta}{\sigma}$，称为标准化残差，遵从标准正态分布 $N(0,1)$。根据标准正态分布表，δ^* 落在 [−2，2] 区间之外的概率 <0.05，是一个小概率事件。如果某一试验点的标准化残差 δ^* 落在[−2，2]区间之外，就有 95% 的置信度将其判为异常点，不能参与回归曲线的拟合。

残基 residue 指组成蛋白质的氨基酸、组成核酸的核苷酸或组成多糖的单糖失去一个或几个水分子的形式。

残留分析样本 sample of residue analysis 为进行农药残留物的定性定量分析而从大量目标物中随机或代表性选取一定容量的样本。样本具有充分的代表性和足够量是获得准确可靠分析数据和进行客观残留评价的基础。按样本来源可分为主观样本和客观样本。主观样本是人们为研究农药残留量和各种因素关系，从设计的试验区域内采集的样本。例如，为农药在某种作物上登记需取得残留评价数据、制定农产品中最高残留限量标准、制定农药合理使用准则以及研究农药在动植物体内代谢和在环境中降解规律等设计一系列试验，所采集的各种样本。客观样本是监测样本，即样本来源于非人为设置的试验区域，测定的农药种类是未知的或施药背景不清楚的样本。例如，为市场管理、环境治理、污染事故调查等提供残留数据而采集的样本，如水、土、动植物样本等。科学的采样方法是获得代表性样本的前提，采样方法则根据分析目的和样本总体的实际情况而定，以随机采样为原则。常用的采样方法有：对角线法、五点法、“Z”形法、“S”形法、棋盘法、交叉法等。

残留物的浓度量级 concentration level of residues 痕量分析中单位词头根据国际单位制（SI），词头统一的名称和符号见附录。中文名称是我国古代数学书中就有的数词，因数为 $10^{-6} \sim 10^{6}$ 的名称已统一用微、毫、厘、分、十、百、千、兆。其他上下 8 个词头仍有不同意见。1981 年由中国国际单位制推荐委员会颁布的“方案”中建议暂使用原文（法文）名称，即采用中文读音，如 ng 读作纳克，pg 读作皮克等。

残硫量 residual sulfur content 黏胶纤维中残存硫的质量，以 100g 纤维中残存的硫及以 S 计量的硫化物的质量（mg）表示。残硫量大会使纤维洁白度差、手感发硬、易老化并降低强力。

残炭 carbon residue 在规定条件下，油品在裂解中形成的残留物，以质量百分数表示。油品裂解中形成的残留物并不完全是炭，而是一种会进一步转化的焦炭，习惯上称为“残炭”。残炭大小是反映石油产品相对生焦倾向的指标，一般精制深的油品残炭小。油品中含氮、硫、氧化物、胶质、沥青质及多环芳烃较多时残炭

增加，裂解时易使设备生焦。对于添加剂含量高的油品是控制基础油残炭，而不是控制成品油残炭。测定残炭的方法有兰姆斯波顿（Ramsbotton）残炭测定器法、康拉德逊（Conradson）残炭测定器法和电炉法，按其测定方法的不同分别称之为兰氏残炭、康氏残炭和电炉法残炭。对于残炭值小于0.1%的油品，则用蒸出90%的馏分后的残留物进行残炭值测定，测得的残炭值称10%残留物残炭。

残炭增值 carbon residue increment 石油产品在规定条件下氧化后测得的残炭与氧化前所测得的残炭之差值，以质量百分数表示。其数值大小反映润滑油的抗老化性能。

残余标准偏差 residual standard deviation 残余方差的平方根值，表征回归方程和回归曲线的精度。

残余电流 residual current 在电解空白溶液（即不含有被研究的对象的溶液）时，在任意电位处所得的电流。

残余硅醇基 residual silanol 又称残余硅羟基。是硅胶基质固定相在进行表面改性和修饰处理时，没有与功能基分子反应的硅醇基（硅羟基）。它也能与溶质分子相互作用（次级相互作用），引起溶质的保留。在很多情况下，残留硅醇基的作用会对目标分离产生不利影响。

残余自由度 residual degree of freedom 在回归分析中计算回归方程残余平方和的独立项的数目。其值 $f=n-m-1$，n 是建立回归方程的试验点的数目，m 是回归方程中自变量的数目。

操作误差 operational error; procedure error 由于操作人员的生理缺陷、主观偏见、不良习惯或不规范操作而产生的误差。是与操作人员的素质有关的，因此又称为个人误差。

侧窗式X射线管 side-window X-ray tube X射线发射窗口位于X射线管一端的侧面，即窗口平行于管轴方向，是最常用的一种X射线管。其特点是结构比较简单，多采用负高压方式工作，即管壳（靶材）接地，因而使用方便、安全。

测定限 determination limit 定量分析方法实际可能测定的某组分的下限。与检出限不同，测定限不仅受到测定噪声限制，而且还受到空白背景绝对水平的限制，只有当分析信号比噪声和空白背景大到一定程度时才能可靠地分辨与检测出来。噪声和空白背景越高，实际能测定的浓度就越高，说明高的噪声和空白背景值会使测定限变坏。

测角头 goniometer head 把单晶样品装在测角仪或是衍射照相机上的仪器构件。通过测角头可以调节晶体的空间指向或是在三个互相垂直的方向上调节晶体的位置，使晶体的某一倒易晶轴与照相机的旋转轴重合或是使晶体的中心与测角仪各旋转轴的交点重合。

测角仪 goniometer 用于测定晶体样品及其衍射线在空间中指向的仪

器设备。在多晶衍射仪上配备的测角仪一般含有两个同轴、但可以分别独立转动的旋转轴。多晶样品安放在一个轴上，通过轴的旋转，使不同的晶面得以满足衍射条件；检测器装在另一个旋转轴上，记录各条衍射线的强度及衍射的角度。单晶衍射仪上一般配备四圆测角仪，四圆测角仪含有四个在空间中交于一点、且可以独立转动的旋转轴，分别称为 2θ 轴、ω 轴、χ 轴和 ϕ 轴，其中 ω 轴、χ 轴和 ϕ 轴为单晶样品提供三维自由度，使指定的衍射得以指向特定的方向，检测器则装在 2θ 轴上，用于测定衍射线的方向和强度。

测量 measurement 以确定被测对象量值为目的的全部操作。在分析化学中，将其称为测定（determination）。它包括对观测值进行的数学处理和对测量不确定度的估计。测试和检定亦属于测量的范畴。当测量是为了实现统一，使量值能溯源到计量标准器具、计量基准器具时，这种测量就是计量。测试（measurement and test）是带有试验性质的测量，当测试已经具有确定的方法和程序，这种测试就已转变为测量；当要求测试方法和量值进行统一，并相应建立了标准，此种测试就转变为计量。测试是测量的先导、扩展和外延，是测量的一种特殊形式；测量是计量的前提；计量是开展测试和测量工作的基础，为测试和测量提供保证，使单位统一，量值准确一致。

测量方法 method of measurement 基于给定的原理、详细说明在实际测量中所涉及的理论应用、实际操作、数据处理和表达方式。

测试 measurement and test 具有试验性质的测量，包括试验和测量。它是测量的先导、扩展和外延，是测量的一种特殊形式，为计量开拓新的领域提供新的技术手段和方法。

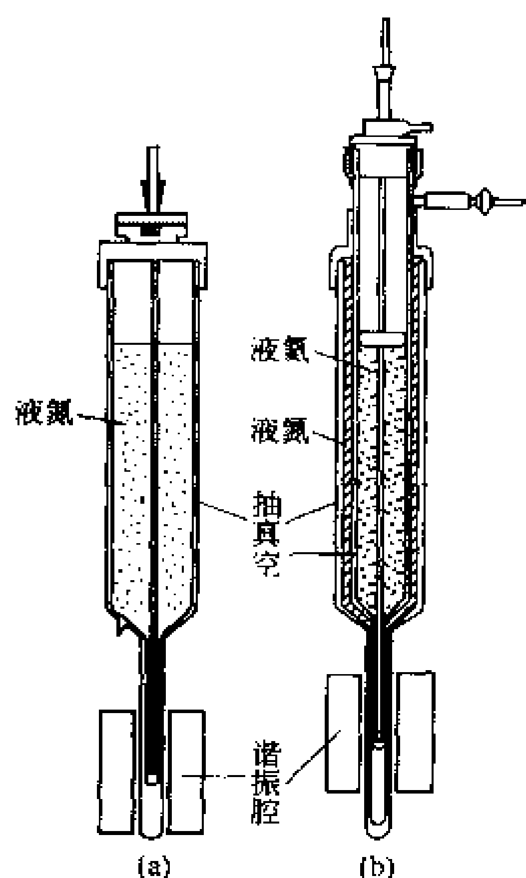
层错 layer dislocation 正常晶体中原子面堆垛顺序局部发生了错排的一种面缺陷。是晶体缺陷的一种。

层流火焰 laminar flame 在火焰原子吸收光谱法中，使用预混合型火焰原子化器，试样气溶胶进入雾化室之后，粒径大的雾珠沿器壁流入泄液管排出，粒径小的气溶胶在雾化室内与燃气、助燃气均匀混合，然后由燃烧器的缝型喷口垂直向上平稳喷出，呈层流状态，燃烧形成的火焰称为层流火焰。此种火焰的特点是受到的扰动小，火焰平稳，噪声小。

层流燃烧器 laminar flow burner 又称为缝型燃烧器。是常用的是单缝燃烧器，此外，还有双缝和多缝燃烧器。它与预混合室、喷雾器共同构成预混合型原子化器。由同心雾化器的节流喷口（文丘里型喷嘴）分散形成细小气溶胶，随气流进入雾化室与可燃气均匀混合后，并经雾化室的缓冲作用，比较平稳地输送到缝型燃烧器，稳定地燃烧产生火焰，特点是火焰基本上不受气流扰动的影响，噪声小，吸收光程长。

插入型杜瓦瓶 insert Dewar bottle 为了延长弛豫时间，有利于检测出顺

磁性金属离子的 ESR 谱，提高灵敏度，检测各向异性等目的，经常需要测量低温特别是液氮温度的 ESR 谱。进行液氮温度 ESR 谱测量时，常使用石英玻璃制插入型杜瓦瓶［如图(a)］。一般可保持液氮温度 20～30min。为了延长保持时间，可在杜瓦瓶内壁镀上一层银。液氦温度用插入型杜瓦瓶需双层降温，即在液氦外面还要装入液氮［如图(b)］。



(a) (b)

差分拉曼光谱 Raman Difference Spectroscopy；RDS 在差示液池中装入相比较的两种样品①和②，由拉曼光谱仪的差比发生器，分别记录实时的拉曼信号（S），并由计算机直接处理得到两个样品的微小差别：其差为 S_1-S_2，比为 S_1/S_2，所得结果即为差分拉曼光谱。

差分脉冲极谱 differential pulse polarography；DPP 又称示差脉冲极谱。在每一汞滴增长到一定时刻，在直流线性扫描电压上叠加一个 2～100mV 的恒定脉冲电压，脉冲持续时间为 40～80ms，在脉冲加入前测量电流 i_1，在脉冲加入后期测量电流 i_2，记录电流的差值 i_2-i_1 作为电流信号的一种极谱分析方法。此法得到的是导数曲线图形。其特点是使干扰的电容电流和毛细管噪声电流充分衰减，使测定的灵敏度和分辨力得到提高。广泛用于痕量物质的分析，如无机物的分析，大约有 30 种金属离子，用该法可使检出限达 $10^{-8}mol \cdot L^{-1}$，与溶出法结合，检出限达 $10^{-9}mol \cdot L^{-1}$以下，而且一次能同时测定多种离子。也能测定许多无机非金属离子，还广泛用于有机物、药物的分析。

差谱 difference spectrum 将两谱图相减、用计算机处理数字化光谱的一种数据处理技术。在红外等光谱技术中俗称为差示光谱。它有两种处理方法。一种是透射率相除法，FTIR 光谱仪在获取透射谱时，首先分别求取样品和背景的单光束光谱，然后以样品的单光束光谱除以背景，即可得样品单光束光谱的透射谱，这个相除过程就是求取以背景为基准的差谱的过程，它可以消除测定时的各种干扰，包括部分仪器噪声，环境中的二氧化碳、水分等的干扰光谱。另一种是吸光度相减法，它是基于吸光度的

加和性、在混合物光谱中去除某已知组分，如扣除溶剂、基体、分离混合物中某些组分等，由解析差谱便可推断混合物组成。对多组分体系可逐级运行差谱以便逐个减去有关组分，达到光谱剥离。对已知组分和未知组分共存的体系，利用它可得组分的定量数据与未知物的谱图，在一定程度上取代了复杂的化学分离工作，因而在混合物分析和研究中有重要意义。在核磁共振实验中，差谱是指将试样在不同实验条件或不同脉冲序列的作用下，所获得的谱图进行相减的技术。谱的相减既可在时域中，也可在频域中进行。它用来剔除混合物谱图中不希望的信号，研究观测温度，pH 值，顺磁粒子等因素的影响，并且在此基础上发展成可对有关谱图进行所谓的“编辑”，即线性代数的处理法，从而进一步了解总谱谱图与亚谱之间的关系，便于解谱等。

差热分析 differential thermal analysis; DTA 在程序控制温度下，测量物质和参比物的温度差与温度关系的一种分析技术。所采用的参比物应是惰性材料，即在测定的条件下不产生任何热效应的材料。所测得的温度差由物质在加热或冷却过程中发生结构、相态和化学性质的变化而产生的。它可用于高温材料的研究，广泛应用于矿物、陶瓷、水泥和冶金等领域。

差热分析和介电分析联用 combined differential thermal analysis and dielectric analysis 在程序控制温度下，对试样采用差热分析和介电分析相结合的分析技术。由于材料相转变时其介电常数会发生突变，因此差热分析和介电分析结合起来可以对材料的热-物理性质有比较全面的了解。目前，该法应用于矿物和聚合材料的相转变研究，特别对于那些非匀相材料（如油页岩）可给出有价值的数据。

差热分析与显微镜联用 simultaneous differential thermal analysis and microscopy 在程序控制温度下，对一个试样同时采用差热分析与显微镜检测的一种技术。这种联用技术可直接观察试样在加热或冷却过程中的相态、结构和表面形貌的变化。

差示分光光度法 differential spectrophotometry 分光光度法中，样品中被测组分浓度过大或浓度过小（吸光度过高或过低）时，测量误差均较大。为克服这种缺点而改用浓度比样品稍低或稍高的标准溶液代替试剂空白来调节仪器的 100% 透光率（对浓溶液）或 0% 透光率（对稀溶液）以提高分光光度法精密度、准确度和灵敏度的方法，称为差示分光光度法。差示分光光度法又可分高吸光度差示法，低吸光度差示法，精密差示分光光度法和全差示分光光度法。

差热曲线 differential thermal analysis curve 由差热分析仪记录的曲线简称为 DTA 曲线。纵坐标为试样和参比物的温度差（ΔT），横坐标为温度（T）或时间（t）。当试样发生任何物理或化学变化时，所释放或吸收

的热量使试样温度高于或低于参比物温度，从而相应地在差热曲线上可得到放热或吸热峰。差热分析也可测定试样的热容变化，它在差热曲线上反映出基线的偏离。

差示热膨胀法 differential thermodilatometry 在程序控制温度下，将棒状试样与用作基准的石英棒并排放置，把两者的一端固定，准确测定自由端位置之差。该法主要用于测定金属或玻璃等坚硬试样的线膨胀。

差示扫描量热法 differential scanning calorimetry; DSC 在程序控制温度下，测量输入到试样和参比物的功率差与温度关系的一种技术。根据测量方法的不同，又分为两种类型：功率补偿型 DSC 和热流型 DSC。目前，该法所使用的差示扫描量热仪具有温度范围宽（-175~725℃或更高温度）、分辨能力高和灵敏度高等特点。由于差示扫描量热仪能定量地测定热力学参数（如热焓、熵和比热等）和动力学参数，所以在应用科学和理论研究中获得了广泛的应用。

差示扫描量热法测定纯度 purity determined by differential scanning calorimetry 该法根据熔点或凝固点下降确定杂质的总含量，基本原理是以 Van't Hoff 方程式为依据。

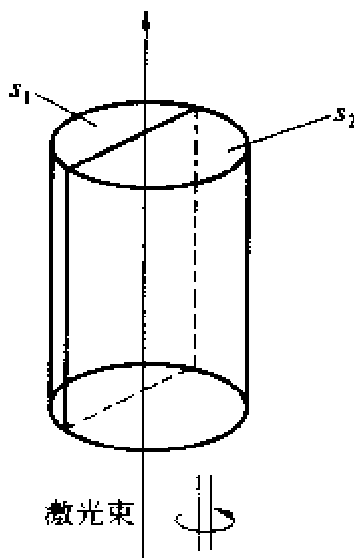
$$T_0 - T_m = \frac{RT_0^2 x_2}{\Delta H_f^0}$$

式中，T_m 是平衡时含杂质样品的熔点；T_0 是平衡时纯样品的熔点；R 是气体常数；ΔH_f^0 是纯样品的熔融热焓；x_2 是样品中所含杂质的摩尔数。目前差示扫描量热仪就配有测定纯度的软件，可方便地测定物质的纯度，此法已用于有机物和药物的纯度分析。

差示扫描量热法与反射光强度测定法联用 simultaneous differential scanning calorimetry and reflective light intensity 在程序控制温度下，对一个试样同时采用差示扫描量热法与反射光强度测定法进行分析的一种技术。该法可测量热焓变化和光学性质的变化，其特点是能检测试样表面变化时的焓变。

差示扫描量热曲线 differential scanning calorimeter curve 由差示扫描量热仪记录的曲线。纵坐标为热流，横坐标为温度或时间。该曲线是热流量随时间变化的曲线，它与基线所构成的峰面积与热焓成正比，所以能定量地计算热力学参数如热焓、熵和比热等。

差示液池 differential cell 拉曼光谱仪中一种隔成两半的分裂样品池，如图所示。样品池装在旋转台上，激



光束依次交替照在分隔为两半的样品池上，Raman 信号也由此交替输出。

差值电子密度合成（差值傅里叶合成） difference Fourier synthesis 在电子密度函数的傅里叶级数表达式中，以实测的结构振幅与根据晶体结构模型计算而得的结构振幅之差乘以由模型算得的相角代替结构因子作为傅里叶系数，计算傅里叶级数的过程。计算而得的傅里叶级数称为差值电子密度函数。差值电子密度函数常用于完成部分原子位置已知的结构，或用于改正部分原子的错误位置。一般把原子坐标位置比较确定的原子放在结构模型中，而将有争议或不确定的原子排除在用于计算结构因子和相角的模型之外，再根据差值电子密度图上出现的正峰和负峰，提出新的结构模型。

掺钕的钇铝石榴石（YAG）激光器 Nd^{3+}: YAG Laser 一种近红外激光光源，它的工作介质是掺钕的钇铝石榴石 Nd: YAG，激光波长为 1064nm。此种激光光源可以降低样品的荧光干扰，用作近红外傅里叶变换拉曼光谱仪的激光光源。

掺杂晶体 doped crystal 当要确定顺磁物质精确的 ESR 参数及相应的主轴坐标，则需测试其单晶样品的 ESR。但对于相当一部分顺磁物质来说，在其纯物质的单晶中，由于顺磁分子之间距离较近，存在强的自旋-自旋偶极相互作用，使单晶 ESR 谱线变宽，从而使单晶 ESR 谱无法解析。为了消除自旋-自旋偶极相互作用，需要用抗磁性物质作为稀释剂，即将微量的顺磁物质与抗磁性物质相混合，然后制备掺杂单晶。在选择抗磁性物质时，需选用与顺磁分子结构相似的分子，或与顺磁性金属离子半径相近的抗磁性金属离子。掺杂浓度一般在 0.5% ~0.1% 或甚至更低。

产品标准 product standard 规定一个产品或一类产品应符合的要求以保证其适用性的标准。它规定了产品必须达到的某些或全部要求，其范围包括：品种、规格、技术性能、实验方法、检验规则、包装、贮藏和运输等。

产物产量检测电子自旋共振 product-yield-detected ESR; PYDESR 自旋多重态分子（自由基）之间发生反应时，要求反应物与生成物的自旋多重度保持不变。电子自旋共振观测的是自旋多重态分子（自由基）吸收微波导致电子自旋反转的现象。因此，若考虑一个发生共振的与另一个不发生共振的自旋多重态分子（自由基）所形成的分子对，则整个体系的自旋多重度伴随着自旋反转而发生变化。如反应中间体的自旋多重度发生了变化，则产物的产量也将发生变化。例如，双重态-双重态体系的反应生成单重态和三重态分子。前者是生成了化学键的稳定产物，而由后者形成激发三重态等。所以，只要利用自旋捕捉、色谱等方法检测不同磁场下产物的产量，虽不用检测微波吸收信号就可知道由微波引起的共振是否已发生。这就是产物产量检测电

子自旋共振的基本原理。PYDESR 谱的横坐标为磁场，纵坐标为产物产量的变化。PYDESR 可用于自由基中间体的鉴定、反应机理及磁场效应等的研究。

常规（或积分）脉冲极谱 normal pulse polarography; NPP 当滴汞电极的汞滴生长到一定面积时，在恒定预置电压的基础上，叠加一振幅随时间而增加的阶梯形脉冲电压，然后在脉冲电压后期测量法拉第电流的一种极谱分析方法。常用于电极过程的可逆性和吸附性的研究。

常量分析 macro analysis 根据分析时所用试样量的多少对分析方法进行分类。通常将试样用量为 0.1 ~ 1g 或体积大于 10ml 的分析称为常量分析。

常染色体 autosome 除性染色体外的所有染色体叫常染色体。在二倍体细胞中，每种常染色体具有两个拷贝。

常压液相色谱法 common-pressure liquid chromatography 指在大气压力下靠重力使淋洗溶液自然渗透通过色谱柱的“经典”液相色谱法。这种液相色谱法在制备色谱中进行初步分离时还仍然使用。通常使用大粒径（如 50μm）填料和长约 100 ~ 150cm、内径约 5 ~ 10cm 的大尺寸玻璃柱。

场发射电子显微镜 field emission electron microscopy 利用场电子发射的原理设计的电子显微镜。其电子束源是采用场发射电子源，因此场发射电子显微镜具有高空间分辨率和亮度，但对真空度有较高的要求。它是目前高分辨率电子显微镜的发展趋势，包括场发射扫描电镜和场发射透射电镜。

场发射电子源 field emission electron source 在表面分析中常采用的很细微但束流很强的电子束源。常采用的场发射电子源为 W 尖（热发射电子源）以及冷发射电子源（肖特基电子源），并加以角限制，使其亮度增加。场发射电子源是目前高分辨电子显微镜和扫描俄歇电子能谱最常用的电子源。场发射电子源的特点是束斑可以聚焦到很细微，但仍能维持很高的亮度，适合需要高分辨率的场合。但场发射电子源需要较高的真空度和较长的稳定时间。

场发射显微镜 field emission microscope 一种表面分析仪器。利用强电场作用于样品表面，使电子或离子从表面发射出来，或使成像气体在样品表面附近电离，所形成的离子从表面附近发射出来，从而分析样品表面的逸出功分布、原子排列分布、离子解吸能、发射原子或原子团的荷质比等特性。包括场电子显微镜、场离子显微镜、场解吸显微镜、原子探针场离子显微镜、成像原子探针等。

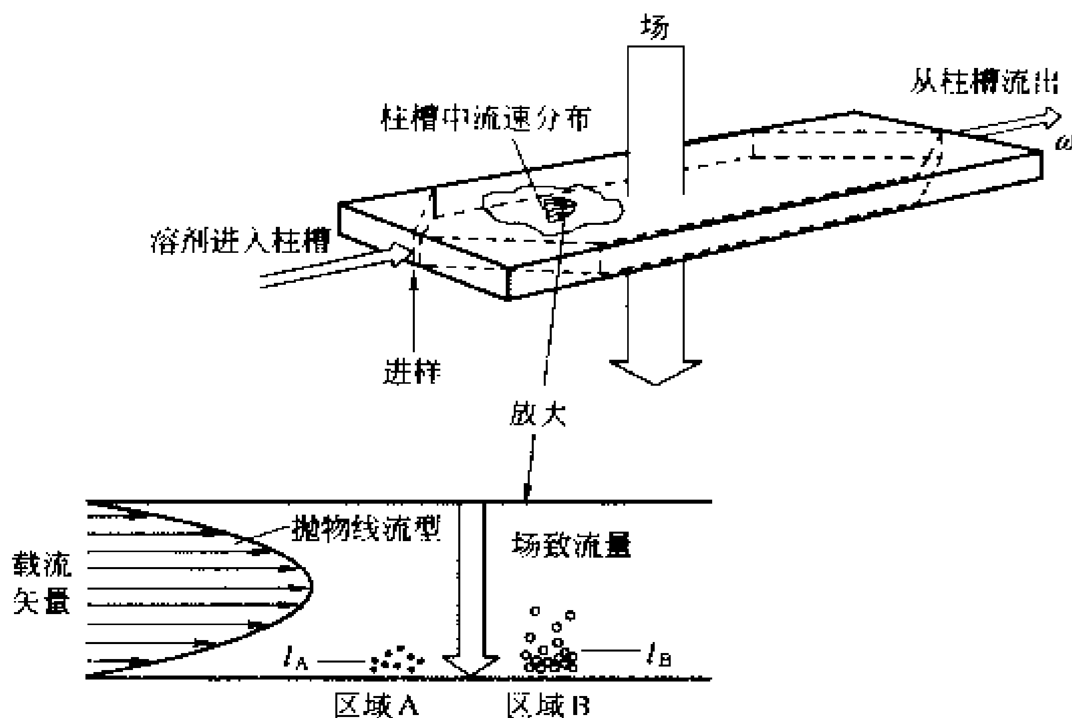
场放大进样 electrical field magnified injection 基于离子的电泳速度与电场强度之间的线性关系。当样品溶液的电阻率高于毛细管中的背景电解质的电阻率时，样品进入毛细管后，在电场作用下样品塞中的离子将

会以更快的速度迁移到区带前沿，直至进入到高浓度缓冲溶液区域而突然变慢下来，于是导致样品塞中离子堆积。利用堆积效应可实现场放大进样。

场解吸 field desorption；FD 适用于热不稳定化合物或不易气化的化合物。将样品溶液涂敷在长有大量晶须的发射体上，当电流通过发射体加热，使吸附在发射体上的样品解吸出来，同时发射体加有一高电压，在发射体表面或晶须尖端形成高电场，样品分子在强电场作用下失去电子生成 M^{+} 分子离子。FD 是一种温和的电离方式，即使热稳定性差的样品仍能得到很强的分子离子峰。离子化效率与样品的性质以及涂敷状态有密切的关系。

场离子显微镜 field ion microscopy；FIM 一种利用场电离原理制备的可以观察尖端表面的单个原子的显微镜。其原理是：在金属尖端周围充以成像气体，利用尖端表面的强场使气体原子电离，使形成的正离子沿径向加速打在荧光屏上，荧光屏上则显示尖端面的显微图像。其特点是极其灵敏，但实验周期较长，实用性较差。

场流分级 field flow fraction；FFF 物质在一个外场和载流的流型共同作用下完成分离，是 20 世纪 60 年代 Giddings 等人所发明的一组分离技术的总称。场流分级不需要填料，不存在固定相，其分离机理有别于一般的色谱分离技术。可用于带电粒子或中性粒子分离，既可用于分子量



场流分级原理示意图及柱槽中载流流线图

大小不同的聚合物，也可用于生物、化学高分子分离与测定，还可得到分子量及其分布的特征。如上图为场流分级的示意图，柱槽是由两块相距 ω 的平行板组成，一个垂直于柱槽方向的外场作用于被分离物质上。被分离的物质在溶剂携带下流经柱槽，在两块平行板之间不同距离处溶剂流速分布如图所示，为抛物线型。而不同物质在外场作用下，在不同径向位置的分布不同。较大分子受到外场作用强，被压至下板壁附近；较小分子受到外场作用弱，分布于两壁中间。分布于两板之间的中心线处的分子获得最大的流速，向前移动最快，而分布于板壁附近的分子向前移动的速度最慢。因此，小分子的保留时间短，先流出，大分子的保留时间长，后流出。

场流分离仪 field-flow fractionation 又称单相色谱仪。是利用物理场使溶质在流经一个空的柱槽时，因质量、体积、扩散系数、电荷等物理性质的差异而分离的仪器。已经商品化的仪器种类有热场流分离仪、离心场流分离仪和流体场流分离仪。因为场流分离仪不需要填料、不存在固定相，所以也称作单相色谱仪，但其分离机理有别于一般的色谱分离技术。它适合于分离和测定大分子化合物、胶体和颗粒样品。

场频连锁 locking the magnetic field to the radiofrequency 利用某共振核的核磁共振的色散信号把磁场强度 $\boldsymbol{B}_0$ 与该共振核的射频频率 f_0 按共振关系式 $2\pi f_0 = \omega_0 = \gamma \boldsymbol{B}_0$ 相关联或联锁起来，使二者保持相对稳定。当磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 没变化，该核满足共振条件，对于色散信号电压 V 为 0，一旦 $\boldsymbol{B}_0$ 漂移，为 $\boldsymbol{B}_0 - \Delta\boldsymbol{B}$ 或 $\boldsymbol{B}_0 + \Delta\boldsymbol{B}$，稍微偏离共振点，将能检测出正电压 $+\Delta V$ 或负电压 $-\Delta V$。将此电压信号放大并反馈到磁通稳定器的补偿线圈，使可产生一个与磁场变化反向的磁场抵消 $\Delta\boldsymbol{B}$，而恢复到共振点。场频联锁系统可弥补磁通稳定器性能的不足，进一步克服场强较小、较慢的变化和漂移，使磁场稳定度达到 $10^{-9} \sim 10^{-10}$ 数量级。

场深 depth of field 物镜在物平面任一边聚焦时，不使像变模糊（即不能模糊到和所获得的分辨率 δ 相比）的可能焦距叫场深。它是物平面两边的两个界面之间的距离，与物镜半孔径角和分辨率 δ 有关。在光学显微镜中习惯称为景深。

场效应生物传感器 field effect transistor based biosensor 以场效应晶体管为信号转换器构置的各类生物传感器。

场致变宽 field broadening 包括电场效应和磁场效应引起的原子的电子能级的分裂所产生的谱线变宽，分别称为斯塔克变宽和塞曼变宽。

场致电离 field ionization; FI 将金属丝或金属针加上高电压，形成 $10^7 \sim 10^8 \mathrm{V \cdot cm^{-1}}$ 的高场强，气态的样品分子在强电场作用下失去电子生

成 M^{+} 分子离子。这种方法适用于可以气化的有机化合物的离子化。它提供给分子的能量约 12～13eV，因此没有过剩的能量使分子离子进一步裂解，是一种温和的"软"电离方式。

超薄切片法 super thin cut 利用机械的方法把样品切成非常薄的薄片的方法。可以通过各种方法控制切片的厚度。该方法广泛应用在生物样品的制备上，也可以利用金刚石刀进行金属样品的切片。该方法容易在样品制备过程引入形变，优点是样品制备迅速和简单。

超超精细结构 superhyperfine structure 在具有未偶电子的金属配合物中，未偶电子基本上定域在中心金属原子（或离子）上，若金属原子具有核自旋，则在 ESR 谱中会表现出超精细结构。有时未偶电子也会通过共价键等离域到周围的配体原子上，使其具有一定的自旋密度，若配体原子具有核自旋，则将也会产生超精细结构。因为由配体原子引起的超精细分裂大多都较小，一般是在中心金属原子引起的超精细结构基础上的进一步裂分，所以称之为超超精细结构，以示与源自中心金属原子的超精细结构相区分。

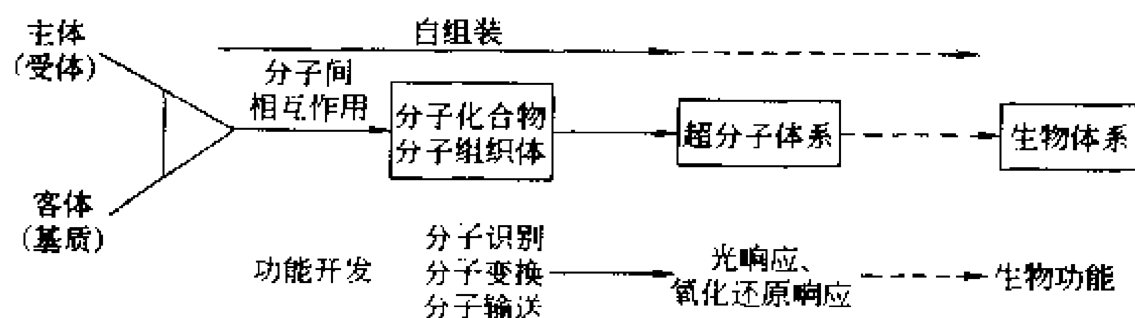
超导量子干涉器件 superconducting quantum interference devices; SQUID 也叫做超导量子干涉仪。是基于磁通量子化概念和超导约瑟夫逊隧道效应而制成的仪器，它是一种灵敏度很高的磁通探测器，分辨率可达 10^{-19}Wb。SQUID 现在是测量和研究极弱的磁场和磁矩等各种磁性质的重要工具。从结构和工作原理上看，SQUID 分为包含两个超导结的直流偏置电流驱动的直流超导量子干涉器件（dc-SQUID）和只含一个超导结的由射频偏置电流驱动的交流超导量子干涉器件（rf-SQUID）。

超电势 overpotential 又称过电势。在某一电流密度下，电极电势偏离平衡电势的值，以 η 表示。对于阴极反应，称为阴极超电势；对于阳极反应，称为阳极超电势。根据超电势产生的原因，超电势可分为电阻超电势、浓差超电势、电化学超电势，欧姆超电势及电结晶超电势等。

超分子 supermolecule 指依靠静电作用、范德华力、氢键作用、电荷转移等分子间作用力，由两个或两个以上分子构建形成的超越单个分子结构与功能的物质构成单位。一般所研究的超分子包括以下几种情况：(1) 少分子体系超分子（oligomolecular supramolecule），指由受体-基质、主体-客体等两个或数个分子构成的超分子，如路易斯络合物、电荷转移络合物、氢键结合形成的络合物以及主客体络合物等，多由不同分子构成。(2) 多分子体系超分子（polymolecular supramolecule），指由数个以上的原子、分子或离子依靠范德华力等弱的粒子间力聚集形成的簇（cluster），或如两亲性表面活性剂分子在水中形成的球状、棒状、层状胶束那样，由很多个（大多数情况下为几十至数

百个）分子集合形成的有序分子集合体，此时多为同种或少数种分子组成，溶剂分子参与的高度有序分子集合体可形成感胶离子液晶（lyotropic liquid crystal），这类超分子常称为分子集合体（molecular assembly）。（3）结晶系超分子（crystalline supramolecule），多个分子不断会合，就会形成凝胶或发生相分离形成结晶，由分子形成的分子结晶也属于超分子的范畴。有的分子结晶在升温时会出现第二个熔点（相转移点）随后转变成各向同性的液相，两熔点间为浑浊的黏稠相，此时虽已失去了分子排列中的三维周期性，但分子依然排列有序，显示光学各向异性，这种液晶态分子也是超分子的一员。（4）高分子量超分子（high-molecular-weight supramolecule），如多肽的二维、三维结构以及多肽本身也是一种超分子，它们由不同的结构单元规则有序地形成。如一个多肽分子内含有不同的结构单元（氨基酸残基），多肽本身就可以看做是氨基酸残基形成的超分子。此类超分子还有核酸等。（5）超分子组织体（supramolecular assembly），如由多肽形成的蛋白质就是超分子组织体，这在生物体内经常可以碰到。在人工合成的体系中也有由超分子作为结构单元构成的高次结构，人们期待从中可以挖掘新的超分子功能。

超分子化学 supramolecular chemistry 与研究以共价键为基础的分子化学相对应，超分子化学是研究多个分子经分子间作用力结合形成的超越分子的组织体（即超分子）的化学。它是在配位化学、酶与基质的选择性作用以及免疫化学的基础上发展起来的。1893 年 A. Werner 提出了配位作用使分子得到选择性固定，并提出了金属络合物的平面、四面体、八面体立体结构，配位化学成为超分子化学的重要基础。1894 年 E. Fischer 将酶与基质的选择性作用比喻为“钥匙与锁”的关系，此即分子识别中的立体互补性原则。而 1906 年 P. Ehrlich 发现的免疫现象确立了受体的概念，提出了“分子不结合就不会有功能”的观点。这些都成为超分子化学的基本观点。超分子化学的概念由 J. M. Lehn 于 1978 年正式提出。如图所示，超分子化学研究的终极目标是发现新的分子功能。



超分子的结构与功能

超高真空 ultra high vacuum; UHV 一般把真空度优于 10^{-7}Pa 以上的真空称为超高真空。表面分析中一般需要优于 10^{-5}Pa 的真空条件。超高真空系统是进行近代表面分析及研究的最主要部分。谱仪的光源、样品室、分析室以及探测器都应安置在超高真空系统中。为了保证电子在顺利通过电子透镜、分析器并进入探测器的整个过程中不与空间残余气体碰撞而改变自己的能量，一般需要优于 10^{-3}Pa 的真空条件（此条件下的电子平均自由程可达 50m）。对于表面分析中的 XPS 常规分析，10^{-5}Pa 的真空条件即可满足需要。而 AES 谱，由于电子束轰击下样品的放气，则需要较高的真空度。表面分析工作一般要求优于 10^{-6}Pa 的超高真空。

超共轭 hyperconjugation 大量实验表明，含甲基的芳烃自由基或半醌自由基中，甲基上质子的超精细耦合常数 a_H 很大，甚至可超过环上质子的 a_H，这是因为甲基上的质子可以通过超共轭机理直接耦合到 π 体系。分子轨道理论认为甲基上的三个质子先形成“群轨道”，即通过线性组合组成三个线性无关的一组新基函数，其中之一的群轨道具有与共轭体系中 $2p_z$ 轨道相同的对称性，可参与整个 π 体系，π 体系中的未偶电子自旋密度就可直接耦合到甲基上的质子上去，导致甲基上的质子具有很大的超精细耦合常数。在 σ 自由基中，如乙基、异丙基自由基等，由于超共轭作用，β 质子的分裂常数也大于 α 质子的分裂常数。

超痕量分析 ultra-trace analysis 被测组分含量在百万分之几数量级的分析通常称为痕量分析（有时将小于质量分数 <0.01% 组分的分析亦称为痕量分析）。比此含量更低的分析测定称超痕量分析，但并无明确的划分界限。痕量分析不一定是微量分析，为测定痕量组分，有时取公斤级的试样。

超交换相互作用 superexchange interaction 是自旋-自旋交换相互作用的一种，特指在晶体或桥连双核或多核金属化合物等体系中，被阴离子相隔的两个顺磁性离子之间存在的跨越阴离子的自旋-自旋交换相互作用。

超精细结构 hyperfine structure 在自旋体系中未偶电子除受外磁场的作用外，还受具有（或分享）此未偶电子的原子核（$I≠0$）的核磁矩的作用，使其能级进一步发生分裂。如原子核的自旋为 I，它在外磁场中有 $2I+1$个不同的取向，因此使电子自旋的每一个能级分裂为（$2I+1$）个次能级，结果便产生服从选择定则 $\Delta m_S=\pm1$，$\Delta m_I=0$ 的（$2I+1$）条等距的 ESR 吸收峰；若有 n 个等价的原子核共享一个未偶电子，则将产生 $2nI+1$ 条等距的吸收峰。这些由原子核的核磁矩引起的多重峰通常称之为超精细结构。而这些谱线间的间距就是超精细耦合常数。

超精细耦合机理 hyperfine coupling mechanism 当生成单重态或三重态自由基对时，随着自由基对中两个未偶电子间距离 r 的增大，交换相

互作用常数 J 减小、最终为零（参看**自由基对机理**条）。理论上可以证明：若 $J=0$、$A\neq0$（自由基对内存在超精细耦合作用）、$\Delta g=0$（两个自由基的 g 值相等），当超精细耦合作用引起的内部平均磁场 $H'\geqslant H$（外磁场）时，单重态 $|S>$ 与三重态（$|T_{-1}>$、$|T_0>$、$|T_{+1}>$）发生混合；但当 $H'\ll H$ 时，$|S>$ 只与 $|T_0>$ 发生混合，即随着磁场强度的增加单重态与三重态的系间窜跃速度减小。这就是超精细耦合机理，与 Δg 机理一样，可用于解释自旋极化和化学反应的磁场效应。

超精细张量 hyperfine tensor 超精细耦合作用是未偶电子自旋与核自旋之间的相互作用，在自旋哈密顿算符中可表示为 $\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{S}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 为总的二级对称超精细张量。$\boldsymbol{A}=a\mathbf{1}+\boldsymbol{T}$，包括了各向同性的费米接触超精细相互作用项 $a\mathbf{1}$（1 为单位张量）和各向异性的偶极-偶极相互作用项 $\boldsymbol{T}$ 两部分。通过测试和解析单晶样品的角度依存 ESR 谱，可得到超精细张量在某一固定实验室坐标系中的各个张量元。对于在实验室坐标系 xyz 中的超精细张量 $\boldsymbol{A}$ 总可以找出一主轴坐标系 XYZ 使其对角化。其对角元即为主值。

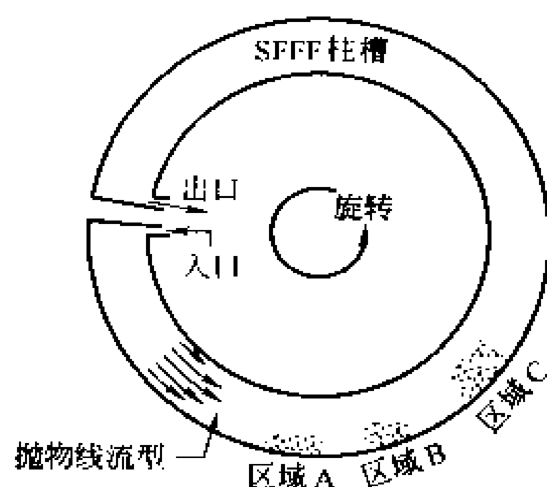
超精细子能级相关谱 hyperfine sublevel correlation spectroscopy，HYSCORE 二维电子自旋回波包络线调制（2D-ESEEM）谱的一种。HYSCORE 采用四脉冲序列（$90°-\tau-90°-t_1-180°-t_2-90°-\tau-$回波），所测定的电子自旋回波强度是两个时间 t_1 和 t_2 的函数，经过两次傅里叶变换，就可得到四脉冲 2D-ESEEM 谱。与三脉冲 2D-ESEEM 谱不同，两个频域轴上的峰的峰宽均由较长的纵向弛豫时间决定，可提高 2D-ESEEM 谱的分辨率。参见**二维电子自旋回波包络线调制**条。

超净实验室 super clear laboratory 对进入实验室的工作人员和空气需进行净化过程的实验室。建设超净实验室的目的是为了控制环境化学空白，这种空白可能来自大气、实验室、仪器、试剂或分析工作者本人。因此在实验室的设计、建设和使用上，始终紧紧围绕着两个问题进行：一是控制和清除污染源，二是一旦发生污染，能迅速有效地从工作区内清除掉。超净实验室室内的洁净等级要达到100 级。

超拉曼散射 hyper-Raman scattering；HRS 又称为三光子散射。当入射激光 ν_0 的功率增强时，在散射光中会出现频率为 $2\nu_0\pm\nu_R$，甚至为 $3\nu\pm\nu_R$ 的分量，其中 ν_R 为拉曼散射。为区别于 $\nu_0\pm\nu_R$ 的正常拉散射，这种效应被称为超拉曼散射。根据超拉曼光谱选律，所有红外活性的振动都是超拉曼活性的，且总是偏振的。

超离心沉降分离分析方法 ultracentrifugation sedimentation separation and analysis 一种用于生物大分子或合成高分子分离、分析的方法。在超离心沉降分离分析法中，离心机转子的转速可达 $6\times10^5\mathrm{r\cdot min^{-1}}$。沉降池

中分子量不同的组分在离心力的作用下以不同的速度向池底移动。达到平衡时，不同分子量的物质的浓度随距旋转轴的距离而分布。用光学方法检测不同距离处的浓度变化或分布，可以获得分子量，分子量分布，沉降系数，浮力密度，扩散系数等参数。从这些参数还可以推测分子尺寸，形状，摩擦系数，压缩系数等。



超临界流体 supercritical fluid 指高于临界压力和临界温度时的一种物质状态。它既不是气体，也不是液体，但它兼具气体的低黏度和液体的高密度以及介于气体和液体之间的较高扩散系数等特征。

超临界流体萃取 supercritical fluid extraction；SFE 超临界流体是处于临界温度和压力以上的流体，如超临界状态下的 CO_2。早在 1897 年就已发现了超临界状态的压缩气体对于固体的特殊溶解作用。超临界流体萃取即以超临界流体作萃取剂直接从固体和液体样品中萃取分离出某种或某类目标化合物的方法。其实验装置与超临界流体色谱仪类似，只是用萃取容器代替了色谱柱，在仪器后有一个馏分收集器用于收集萃取出来的样品。SFE 不使用有机溶剂（有时使用少量有机改进剂），产品易于纯化，污染小，在天然产物的分离制备中已有较多成功的应用实例。

超临界流体色谱 supercritical fluid chromatography；SFC 以超临界流体作流动相，以固体吸附剂（如硅胶）或键合在载体（或毛细管壁）上的有机高分子聚合物作固定相的色谱方法。常用流动相为超临界状态下的 CO_2、氧化亚氮、乙烷、三氟甲烷等。CO_2 最常用，因为它的临界温度低（31℃）、临界压力适中（7.29MPa）、无毒、便宜，但其缺点是极性太低，对一些极性化合物的溶解能力较差。所以，通常要用另一台输液泵往流动相中添加 1% ~5% 的甲醇等极性有机改性剂。SFC 所用色谱柱既有液相色谱的填充柱，又有气相色谱的毛细管柱，但由于超临界流体的强溶解能力，所使用的毛细管填充柱的固定相必须进行交联。从理论上讲，SFC 既可以像液相色谱一样分析高沸点和难挥发样品，也可像气相色谱一样分析挥发性成分。不过，超临界流体色谱更重要的应用是用来作分离和制备，即超临界流体萃取。

超临界流体色谱-傅里叶变换红外光谱联用 supercritical fluid chromatography/Fourior transform infrared spectrum；SFC/FTIR 超临界流体色谱的流动相是超过了其临界温度和压力的流体，黏度像气体，而密度则像

液体，溶质在超临界流体中有较大的扩散系数。通过一定的接口技术实现它与FTIR的联用．一种接口是高压流动池，色谱馏分连同超临界色谱的流动相一起通过流动池；第二种接口采用溶剂脱除技术，每个馏分在测定光谱前，首先将溶剂脱除。在超临界流体色谱中，流动相在常温常压下即为气体，脱除流动相比在HPLC中简单得多，对每个馏分进行测定时，流动相没有干扰，该方法对分析非挥发性物质的灵敏度非常高。

超临界流体色谱仪 supercritical fluid chromatograph 是专门用于超临界流体色谱分离的一种色谱仪器。它与普通液相色谱仪的不同之处是它的流动相需要有控制温度和压力的装置来保证流动相（如 CO_2）处于超临界状态。其检测器则是液相色谱中最常用的紫外检测器和气相色谱中常用的氢火焰离子化检测器。

超滤 ultrafiltration 将一般过滤法难以分离的细小胶体微粒从分散介质中分离出来的方法。自1906年H. Bechhold最早使用该法以来，超滤法已广泛应用于胶体的提纯、浓缩。用于超滤分离的过滤膜称为超滤膜。早期使用的超滤膜有火棉胶膜、明胶膜、玻璃纸膜等。随着高分子材料的发展，使用不同孔径的多孔性高分子膜可以将不同大小的物质分离开，已成为超滤分离的主流。根据过滤分离物质的粒径不同，过滤法可分为一般过滤（分离粒径在1μm以上的物质）、精密过滤（microfiltration，分离粒径在0.02～10μm之间的物质）和超滤（分离粒径在1～10^3nm的物质，分子量在10^3～5×10^5之间）。超滤是以压力差为推动力的膜分离过程，超滤膜是非对称性膜，其表面活性层有孔径为1～20nm的微孔，能够截留分子量大于500以上的大分子和胶体微粒。广泛用于水中极细微粒，包括细菌、病毒、热原和其他异物的除去，以及汽车和家具等金属制品电镀淋洗水处理，在乳制品等生产中也广泛使用。

超瑞利散射 hyper-Rayleigh scattering 对于没有对称中心的分子，当入射激光 ν_0 的功率增强时，在散射光中会出现 $2\nu_0$，甚至 $3\nu_0$ 的散射分量，为区别于 ν_0 正常瑞利散射，将这种效应称为超瑞利散射。如四氯化碳，没有对称中心，所以在超拉曼光谱中出现了超瑞利散射谱带。而乙烷由于具有对称中心，所以不出现超瑞利谱带。

超声波探伤 ultrasonic examination；UT 利用超声波物性探测工件表面和内部缺陷、或检测材料性能的无损检测方法。超声波由耦合介质传送到被检测物内，被物内缺陷反射、透射或折射，由换能器接收，经数据处理，可以检测和显示缺陷的部位和大小。超声波检测常用的方法有脉冲反射法和连续波透射法。优点是方向性好、穿透性强，检测灵敏度高，不破坏试件，易于实现自动化、对人体无损害。在大型锻铸焊件、型材和设备质量检测方面有广泛的应用。缺点

是难于定性和定量。

超声波脱气 ultrasonic degas 在液相色谱中，用超声波发生装置脱去流动相中溶解的小分子气体（氧气、二氧化碳等）。流动相溶液在配制过程中和放置期间会慢慢溶解气体，这些气体会影响色谱分离，使用前需进行脱气操作。

超声喷雾电离 sonic spray ionization 从毛细管端口流出的样品溶液，利用超音速的气流使之进行喷雾，同时生成离子。它是一种既不加热也没有高电场的大气压离子化法。

超声雾化器 ultrasonic nebulizer 利用超声波振动作用将试液雾化为气溶胶并引入原子化器的装置。优点是雾化效率高，不受载气流速的影响，获得的气溶胶粒度细且分布范围窄。

超顺磁性 superparamagnetism 铁磁性或反铁磁性微粒集合体所表现出的顺磁性称为超顺磁性。它们虽然有被弱磁场饱和磁化的倾向，但却有不显示磁滞回线、没有残留磁化、磁化率在低温也遵循居里规则等特点。其原因可定性地解释为，每一个微粒内部虽然具有铁磁性或反铁磁性的磁矩排列，但当在热能大于束缚这些粒子的相互作用能量的温度下，与普通的顺磁性一样，各个微粒的磁矩随机取向，作为微粒间的磁矩被相互抵消，只有在外磁场下才能引起磁化。通过分析磁化曲线可以确定微粒的大小及其分布。

超微传感器 ultra-micro sensor 利用超微的信号转换器而构置的各类生物传感器。

超微电极 ultramicroelectrode 直径小于 100μm 的电极。它呈现出传质快，响应迅速，*IR* 降小以及信/噪比高等优良的电化学性质，适合于微区和痕量分析、进行快扫伏安和电极过程动力学研究。

超微量分析 ultra-micro analysis 根据分析时所用试样量的多少及操作规模的不同对分析方法进行分类。将试样量少于 0.1mg 或体积少于 0.01ml（有时指少于 50μl）的分析称为超微量分析。但这种分类并无严格的标准。

超微弱发光 ultraweak luminescence 发光强度十分微弱的化学发光和生物发光。生物界普遍存在着超微弱发光现象，如植物的根、动物的肝和脑、血浆、甚至呼吸都存在超微弱发光现象。这类发光肉眼观察不到，约为 $10^{-15} \sim 10^{-9}$ W。如果说经过暗反应之后，人的视网膜能感知 3×10^{4} 个/$s^{-1} \cdot cm^{-2}$（光子）的照度，那么这类光的强度只有它的 $^{1}/_{10000} \sim {}^{1}/_{1000}$ 。

沉淀的陈化 ageing of precipitation 沉淀过程完成后，沉淀与母液一起放置一定时间后再过滤的过程。陈化过程主要涉及初生成的沉淀微粒的重结晶过程和亚稳态晶型转变为稳态晶型的过程。由于小颗粒沉淀的溶解度大于大颗粒沉淀的溶解度，通过陈化过程，可以获得粒度更大，晶体结构更为完整和纯净的晶型沉淀。加热和搅拌可以加速陈化过程。陈化过程只适

于晶型沉淀。

沉淀的消化 digestion of precipitation 即沉淀的陈化，亦称沉淀的 Ostwald 熟化。参见**沉淀的陈化**条。

沉淀分离法 precipitation separation 利用被测组分和干扰组分与沉淀剂反应的产物溶解度不同而进行分离的方法。通常选择合适的沉淀剂使干扰组分或被测组分沉淀析出，或者控制介质 pH 值，用某些沉淀剂进行分步沉淀。沉淀反应的选定必须考虑欲测组分和干扰组分的相对含量及沉淀剂本身对以后测定的影响。

沉淀吸附浮选 floatation by precipitation adsorption 用少量无机或有机沉淀剂，或控制溶液 pH 值使欲分离的离子沉淀或共沉淀，然后加入与沉淀表面反电荷的表面活性剂，使其亲水基团定向于沉淀表面从而增加沉淀的疏水性并吸附于气泡上而被浮选的方法。

沉降常数 sedimentation constant 在超离心沉降分离分析中，密闭沉降池中，物质的沉降系数可表示为

$$S=\frac{\frac{dr}{dt}}{\omega^2 r}=\frac{M\left(1-\frac{\rho_0}{\rho_2}\right)}{N_A f}$$

式中，$\frac{dr}{dt}$为沉降速度；r 为沉降距离；ω 为离心机转子的角速度；M 为溶质的摩尔质量；N_A 为阿佛加德罗常数；ρ_0、ρ_2 分别为溶剂和溶质的密度；f 为摩擦系数，f 与温度，溶液浓度，黏度等因素有关。浓度外推至 0 时的摩擦系数 f_0 与浓度无关。这时沉降系数 S 可表示成

$$S=\frac{M\left(1-\frac{\rho_0}{\rho_2}\right)}{N_A f_0 G\ (c)}$$

式中，$G(c)$ 是与溶液浓度有关的函数。当浓度较大时，因分子间相互作用，S 不能直接作为分子尺寸和形状的参数。通过外推法求得浓度接近于 0 时的 S 值，称为沉降常数，用 S_0 表示。S_0 与扩散系数 D_0 的关系是

$$M=\frac{S_0}{D_0}\cdot\frac{RT}{1-\frac{\rho_0}{\rho_2}}$$

用此式测定分子量是一种绝对方法，与分子结构的类型无关。称为 Svedberg 方程。根据此式可测定蛋白质，合成高分子等的分子量。参见**沉降系数**条。

沉降场流分级 sedimentation field flow fraction; SFFF 在场流分级法中，将条形柱槽弯成圆形，置于离心机中，并绕其中心旋转，进入柱槽的溶质分子在离心力作用下向柱槽外壁方向运动，同时由于扩散效应又向相反的方向运动。所以溶质在离心机径向方向的位置取决于溶质的分子量等因素。在溶剂流的带动下，溶质分子又要向沿柱槽的圆周方向运动，不同径向位置的溶质分子移动速度与溶剂流型有关。因而不同分子量的物质可以获得分离，其分离原理如图。沉降场流分级可用于生物大分子的分离，以及胶态粒子，如各种纳米级粒子的分级与分离。

沉降平衡 sedimentation equilibri-

um 在超离心沉降分离分析法中，沉降场作用于溶液中摩尔质量为 M，密度为 ρ_2 的溶质分子上的离心力为

$$F_{离} = \frac{M}{N_A}\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_2}\right)\omega^2 r$$

式中，ρ_0 为溶剂密度；ω 为离心机角速度；r 为被测分子与旋转轴之间的距离；N_A 是阿佛加德罗常数。另一方面，溶质分子在运动中还要受到摩擦力的作用，其大小为 $F_{摩} = f \cdot \frac{dr}{dt}$。当达到沉降平衡时，分子所受的离心力等于摩擦力，即

$$\frac{M}{N_A}\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_2}\right)\omega^2 r = f\frac{dr}{dt}$$

此式为沉降平衡方程。式中，f 为摩擦系数；t 为时间。沉降速度 $\frac{dr}{dt}$ 和距离 r 可以用光学方法测定。角速度 ω 由试验设定。在超离心沉降实验中，可以测定沉降系数 S

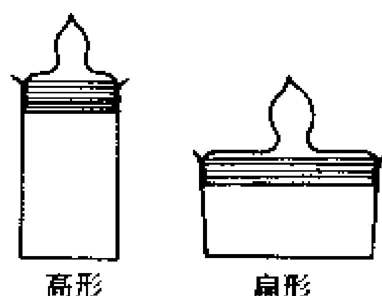
$$S = \frac{\frac{dr}{dt}}{\omega^2 r} = \frac{M\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_2}\right)}{N_A f}$$

沉降系数 sedimentation coefficient 表示一个分子在单位离心力场（$G = \omega^2 r$）作用下所产生的沉降速度。可由沉降平衡方程求得

$$S = \frac{\frac{dr}{dt}}{\omega^2 r} = \frac{M\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_2}\right)}{N_A f}$$

式中，$\frac{dr}{dt}$ 为沉降速度；r 为沉降距离；ω 为离心机转子的角速度；M 为溶质的摩尔质量；N_A 为阿佛加德罗常数；ρ_0、ρ_2 分别为溶剂和溶质的密度；f 为摩擦系数。通过测定不同分子量的物质带的界面在不同时间 t 时的位置 r，以 $\ln r$ 对时间 t 作图，从直线斜率除以 ω^2，即可求得 S。S 一般是在极稀的溶液中测定，其量纲是时间，数量级通常为 10^{-13} s，常用 Svedberg（S）作单位，$1S = 10^{-13}$ s。参见沉降平衡条。

称量瓶 weighing bottle 分析实验中，干燥和称量固体试样时常用的一种玻璃仪器（如下图）。称量瓶的瓶和盖间由标准磨口配合使其在需要（如保存试样）时能保持密封。用称量瓶称量样品应采用减量法（亦称差减法），即首先准确称量盛有试样的称量瓶的质量（m_1），然后按一定操作取出大致所需量的试样用于分析，再准确称量该称量瓶的质量（m_2），则 $m_1 - m_2 = \Delta m$ 则为所称试样的准确质量。



称量形式 weighting form 指沉淀重量法中所得沉淀经过滤、洗涤、灰化和灼烧后，在称量时的化学式。由沉淀的称量形式的量，可计算试样中被测物的含量。例如，为测定某矿石中的镁含量，常以 $MgNH_4PO_4$ 的形式将其沉淀使其与其他成分分离，该沉淀经过滤、洗涤、灰化和灼烧转变为

$Mg_2P_2O_7$（焦磷酸镁）后进行称量，由 $Mg_2P_2O_7$ 的量可计算试样中镁的含量。此时 $Mg_2P_2O_7$ 称为沉淀的称量形式。

成对比较试验 paired comparison experiment 将被比较的两因素成对地进行比对试验。在试验受其他因素干扰较大，而试验精度又不理想的情况下，采用成对试验法效果较好。它是试验研究中经常采用的一种试验设计方法。如用标准分析方法检验新建立的分析方法，考察两分析人员的技术水平，检查两实验室是否存在系统误差等，都可用成对试验法安排试验，对成对数据的差值 d 进行 t 检验。

成核作用 nucleation 少量沉淀构晶离子聚集在一起产生固相微核的过程。沉淀的形成涉及一系列过程，当沉淀剂加入到试验溶液中形成沉淀时，首先要达到过饱和，即液相中含有比平衡时更多的溶质（沉淀物）。这是一种亚稳定状态，存在一种推动力使该体系趋向平衡，此即成核作用开始。成核作用又可分为均相成核和异相成核。为得到颗粒较大，从而易于过滤洗涤的晶型沉淀，需控制沉淀以实现异相成核。

成品分析 product analysis 对经过加工的成品钢材（包括钢坯）按规定方法采取试样，进行的化学成分分析。成品分析主要用于验证化学成分，故又称验证分析。由于钢液在结晶过程中产生元素的不均匀分布（偏析），成品分析的值有时与熔炼分析的值不同。

成像 XPS 谱仪 image XPS 一种高分辨率的 XPS 谱仪，利用 XPS 成像技术对样品某个区域进行分析，得到丰富的化学成键信息。主要是利用 X 射线辐照样品表面，用光电子能量成像器获得表面元素分布图像和元素化学状态图像。这是完全不同于电子显微镜的一种成像方式，它与材料表面的形貌无关，形成的是元素像或化学状态像。目前，先进的成像 XPS 谱仪的空间分辨率可以达到 3μm 左右。

(乘)积算符方法 product operator method 单核自旋体系用磁量子数 m_I 描述其本征态，对 $m_I=\frac{1}{2}$ 的态为 $|\alpha>$，$m_I=-\frac{1}{2}$ 的态为 $|\beta>$。二核自旋体系有 4 个线性独立的态函数，可用单态的乘积作为基函数 $|\alpha_1\alpha_2>$、$|\alpha_1\beta_2>$、$|\beta_1\alpha_2>$、$|\beta_1\beta_2>$。它们的线性组合才是能量（汉米顿量）的本征函数。任一态函数可用基函数的线性组合而成。某一物理量（可用算符来表示）作用于体系后将使它变成另一态函数。若系统有 n 个线性独立的态函数，就有 n^2 个线性独立的算符。因密度算符可以用角动量算符来表示，对于 $I=\frac{1}{2}$ 单自旋（二态）体系，有单位算符 E 与 3 个角动量算符 I_x、I_y、I_z 作为基算符，其他算符都用它们的线性组合表示。简单的积算符不表示纯 P 阶的量子

相干，例如 $2I_{kx}I_{lx}$ 是零量子和双量子相干的叠加。纯 P 阶量子相干是它们的线性组合，纯二量子相干为 $2I_{kx}I_{lx}-2I_{ky}I_{ly}$、$2I_{kx}I_{ly}+2I_{ky}I_{lx}$。纯零量子相干为 $2I_{kx}I_{lx}+2I_{ky}I_{ly}$ 和 $2I_{ky}I_{lx}-2I_{kx}I_{ly}$。类似于磁化矢量表示法积算符也可以用“矢量”图表示。作用体系的各种物理量可以用算符来表示：化学位移的作用为 $\Omega_k I_{kz}$，$\Omega_l I_{lz}$，射频作用为 $\varphi_x I_{kx}$，$\varphi_y I_{ky}$，$\varphi_x I_{lx}$，$\varphi_y I_{ly}$，自旋标量耦合作用为 $\pi J_{kl} I_{kz} I_{lz}$。它们对 NMR 实验体系的作用可以用相应算符的乘积来表示。算符乘积的乘法法则已有运算表可查用。

程序变流色谱法 programmed flow (gas) chromatography 是指在色谱（气相色谱或液相色谱）分析中，色谱柱柱温保持不变，流动相（载气或淋洗剂）的流速依照设置的适宜程序连续地随时间呈线性或非线性地变化，它的作用类似于**程序升温色谱法**。当样品中所含组分的保留性能差别较大而不能均匀地馏出色谱柱时，采用程序变流色谱法可以改善组分之间的分离和缩短分析时间，尤其适用于气相色谱中热稳定性差的样品的分析。

程序升温 temperature program 在元素电热原子过程中，对其各个阶段的温度和时间依次进行设置。原子化的升温程序通常分为四个阶段：(1) 干燥，蒸发除去溶剂；(2) 灰化，分解除去无机和有机物基体；(3) 原子化，被测元素转变为自由状态的原子；(4) 除残（空烧），清除炉内残留物，消除记忆效应。对每一阶段的温度和时间都需进行设定，仪器按照设定的程序自动完成整个原子化过程。

程序升温进样 programmed temperature sampling 一种进样方法。把液体样品注入气化室的衬管后，打开分流阀，使载气以 50 ~ 100ml · min^{-1} 的流速把溶剂吹出分流口，而溶质仍旧以液态留在衬管中，然后对衬管进行程序升温，使溶质汽化后再用载气吹入色谱柱中进行分离分析，这种进样方法相当于不分流进样，对解决大体积进样问题提供了可能。

程序升温色谱法 programmed temperature (gas) chromatography 在气相色谱分析中，色谱柱温度对分离效能有重要影响，当样品中所含组分沸程较宽时，应采用程序升温色谱法。所谓程序升温色谱法，是指色谱柱的温度按照组分沸程设置的程序连续地随时间线性或非线性逐渐升高，使柱温与组分的沸点相互对应，以使低沸点组分和高沸点组分在色谱柱中都有适宜的保留，色谱峰分布均匀且峰形对称。各组分的保留值可用色谱峰最高处的相应温度即保留温度表示。参见**保留温度**条。

程序升温蒸发器 programmed temperature vaporizer; PTV 一种综合了分流、无分流和柱上进样的优点的通用样品引入方式。其结构与分流进样器相似，特点是进样器可以快速升温和冷却，程序升温速度为 2 ~ 12℃ · s^{-1}，最高温度达 600℃，冷却剂用液氮或液体 CO_2。液态样品冷注射进入内填玻璃毛的衬管，借快速升温把样品蒸发

后由载气引进柱内;固体样品(放入衬管中)中的挥发性组分可借助程序升温把挥发性组分迁移至柱内进行分析,结束后将固体残留物取出;气体样品可在 PTV 上冷聚集,利用衬管内的吸附剂可对目标组分进行浓缩,改进后的 PTV 可以扩充样品的沸点范围,还可实现大体积进样。

程序升压 programmed pressure 在超临界流体色谱中,为调整被分离组分的保留值,使各组分能得到更好的分离而采用的一种改变压力的技术。由于操作压力的变化会带来超临界流体(流动相)密度的变化,因而使被分离组分的相对保留值发生变化,亦即压力随时间程序地变化的结果是改善了组分彼此间的分离效果。

弛豫能 relaxational potential 在弛豫效应中,不同的终态处理所得的结合能之差。弛豫能分原子内项和原子外项两部分,原子内项包括单独原子内部电子的重新调整所产生的影响,对自由原子只存在这一项;原子外项是指与被电离原子相关的其他原子的电子结构重新调整所产生的影响,对于分子和固体,这一项占有相当的比例。在通常的情况下,原子外项弛豫能可以用极化能来解释。

弛豫势能模型 relaxational potential model;RPM 在用量子力学的方法计算某原子轨道上的电子的化学位移时,考虑弛豫效应的一种理论计算模型,即考虑芯电子引起的弛豫能的变化。在一般的化学效应分析中假设随着化学环境的变化,内弛豫能保持不变。对于气体自由分子,弛豫势能模型比电荷势能模型能更好地解释化学位移现象。但对于固体,影响化学位移的因素要比气体复杂得多,此时应考虑到被研究原子周围点阵的原子对它产生的明显的外部弛豫作用。

弛豫试剂 relaxation reagent 加入试样溶液中能使试样中被测核的弛豫时间 T_1、T_2 缩短,而又不产生明显的谱线的位移和加宽的试剂。最常用的是过渡金属络合物 $Cr(acac)_3$ 和 $Fe(acac)_3$(acac 是乙酰基丙酮基),具有 $4f^7$ 电子结构的 Gd^{3+} 和 Eu^{2+} 化合物也可作为弛豫试剂。加入弛豫试剂可大大缩短核的弛豫时间和脉冲序列中的重复时间,在较短的时间内可得到信噪比较好的谱图。强烈的弛豫作用,可淬灭核的欧沃豪斯(NOE)效应,从而使各种基团核的弛豫时间基本相等,于是可用 NMR 谱峰面积进行定量分析。利用弛豫试剂也能获得结构信息、估算分子中各原子的相对位置和键角。

弛豫效应 relaxational effect 在光致电离过程中,由于体系电子结构的重新调整而导致元素结合能的变化叫做弛豫效应。弛豫效应将使光电子谱线向低结合能方向位移。弛豫效应的影响因素很多,在一般情况下对化学位移的贡献要比电荷效应要小得多,但个别情况会有较大的影响,尤其是对于一些极性物质。

池入-池出法 cell-in-cell-out Method 在特定的分析条件下,先测定纯溶剂的透光率 I_0,然后在同一吸收池

内测定已知浓度为 c_s 的标准溶液的透光率 I_s，再在同一吸收池内测定样品溶液的透光率 I_x。基于比尔定律，由 I_s、I_x 和 c_s 可求得样品溶液的浓度 c_x。此法适用于单光束红外光谱仪器，直接记录透光率。

迟发型变态反应　delayed hypersensitivity　又称迟发型超敏反应。是Ⅳ型变态反应，由致敏 T 细胞与相应的抗原结合而引起的、属于以单个核细胞浸润和细胞变性坏死为特征的局部超敏反应性炎症。因反应发生较迟缓，一般在再次接触抗原后 48～72h 发生，故称为迟发型超敏反应。Ⅳ型变态反应是 T 细胞介导的组织损伤。参与Ⅳ型变态反应的 T 细胞主要有 T_{DTH} 细胞及 CTL 两个亚群。T_{DTH} 细胞与相应抗原结合后，能释放多种淋巴因子，而 CTL 则能直接杀伤靶细胞。由于Ⅳ型变态反应的发生机制与细胞免疫效应一致，因此常用皮肤迟发型变态反应作为检测机体细胞免疫功能的一项指标。

尺寸匹配作用　size-fit　分子识别中主客体结合时的一种驱动作用。如环糊精的 α-，β-，γ-异构体空腔尺寸不同，就像酶的疏水口袋一样，当客体尺寸与环糊精内腔大小一致时可以通过疏水作用力彼此结合。多个芳香环组成的环芳烃、杯芳烃也同样依靠尺寸匹配作用结合客体分子。引人注目的一例是环糊精与 C_{60}，杯芳烃与 C_{60}、C_{70} 的结合，此类主客体包络物的形成可以提高客体分子的水溶性或可以使这类重要分子得到进一步纯化。

充电电流　charging current　由双电层的微分电容产生，总是和法拉第电流叠加在一起，因而对法拉第电流的测量产生干扰性的影响。

虫卵沉淀法　sedimentation method　原虫包囊和蠕虫卵密度大于水，可沉淀浓集于粪便与水的混悬液沉渣中，提高检出率。但对密度略大于 $1g \cdot cm^{-3}$ 的原虫包囊和钩虫卵则效果较差。沉淀法包括自然沉淀法、离心沉淀法、汞碘醛离心沉淀法和醛醚沉淀法等。

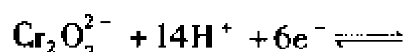
虫卵计数法　egg-counting method　定量计数虫卵数目的方法。用以估计人体内寄生虫的感染度，以及确认药物疗效和防治效果。常用方法有定量加腾厚涂片法、司氏稀释虫卵计数法等。

重复抽样　sampling with replacement　亦称放回式抽样。每次从样品总体中抽取的样品单位，经检验之后又再放回总体内，参加下次抽样。每次抽样时总体中样品单位数是不变的，每个样品单位在各次抽样时被抽中的概率是相同的。

重复性　repeatability　在同一实验室由同一分析人员、用同一分析仪器与方法，对同一量相继进行两次重复测量时，两次重复测量值按指定概率的容许差。只进行两次测量时，重复性用 r 表示，$r = 1.96\sqrt{2}S_r = 2.83S_r$。如果进行了 n 次重复测量，衡量 n 次重复测量精密度的重复性 $r_n = k_n S_r$，式中，1.96 是置信度为95%时的置信

系数；$\sqrt{2}S_r$ 是两次重复测量值之差值的标准偏差；S_r 是单次测量的标准偏差；k_n 为对测定次数的校正系数，可由统计书和手册中查得。重复性用来检查重复测量的精密度是否符合要求，若最大与最小测量值之差值小于 r 或 r_n，则认为重复测量的精密度合格；若差值大于 r 或 r_n，说明重复测量的精密度不合格。

重铬酸钾法 potassium dichromate method 一种以重铬酸钾（$K_2Cr_2O_7$）为氧化剂的氧化还原滴定法。它基于 $K_2Cr_2O_7$ 在酸性介质中与还原剂反应，$Cr_2O_7^{2-}$ 被还原为 Cr^{3+}





$$Cr_2O_7^{2-} + 14H^+ + 6e^- \rightleftharpoons 2Cr^{3+} + 7H_2O \qquad \varphi^{\Theta} = 1.33V$$

重铬酸钾法已广泛用于多种还原性物质如 Fe^{2+}、环境化学耗氧量（COD）等的测定，其中重铬酸钾滴定 Fe^{2+} 被列为铁矿中全铁量测定的标准方法。相对于用高锰酸钾为氧化剂的滴定法（称高锰酸钾法），重铬酸钾法具有 $K_2Cr_2O_7$ 易于提纯，可由直接配制标准溶液；标准溶液非常稳定和因氧化能力稍低于高锰酸钾，即使在 $1mol \cdot L^{-1}$ 的 HCl 中也不与 Cl^- 反应，受其他还原性物质干扰亦较少等优点。

重建离子流色谱图 reconstructed ion chromatogram 由质谱数据系统将采集储存的质谱数据按不同需求进行处理，获得各种重建的图谱，如不同归一方式的总离子流色谱图（BP）、提取不同质量离子或称选择离子质量色谱图（EIC/SIC）等。

重建色谱图 rebuild chromatogram 凭借 GC-FTIR 数据而重新建立的色谱图。重建色谱图的方法有总吸光度法（total integrated absorbance，TIA），最大吸光度法（maximum absorbance construction，MAC）、Gram-Schmidt 重建法（Gram-Schmidt construction，GSC）和吸光度 Gram-Schmidt 重建法（absorbance Gram-Schmidt construction，AGS）等四种。TIA 类似于 GC-MS 联机中的总离子流色谱图。其组建过程与官能团色谱相似。所不同的是 TIA 的窗口设置很宽，以使各类化合物的主要红外吸收尽可能地包括其中，且一般是在色谱运行结束后，处理存贮的数据得到的，可以取较多的数据点。这种方法取得的色谱信号是一个很宽波数范围内的吸光度平均值，其信噪比低。MAC 法取预设的波数窗口内的吸光度最大值作为色谱信号，与 TIA 相比，大大提高了信噪比。GSC 法基于 Gram-Schmidt 矢量正交化法，从干涉谱数据直接取得与光管（相当于红外的气体池）中馏分浓度相关的信号作为色谱响应值。AGS 法也采用 Gram-Schmidt 正交化处理扣除与背景线性相关的部分，以取得仅与馏分相关的信号作为色谱的响应。但是它处理的是红外吸光度数据，而不是干涉谱数据。

重结晶 recrystallization 将晶体先用溶剂或加热溶解，或加热熔融，然后又重新从溶液或熔融体中结晶的一种过程，是提纯物质的一种方法。

重排反应 rearrangement reaction

在质谱中，被电离的样品分子可能同时发生两根键断裂，并产生基团转移，生成新的结构单元离子。这种变化被称为重排反应。最常见的重排反应是经六元环或四元环过渡迁移，失去中性小分子的反应。

重排离子 rearrangement ion 在质谱分析中，经重排反应产生的离子。在重排时，至少同时涉及两根化学键的变化，伴随有原子或基团的转移，生成了原化合物不存在的结构单元的离子。

抽象因子分析 abstracted factor analysis 因子分析法中的一种。因子分析是一种多元统计分析方法，通过对数据进行解析，可以获得影响数据的因子数目。1970 年 J. J. Kankare 首次将该法用于分析测试中，用抽象因子分析法解析配位化合物的吸光度数据以确定体系中存在的吸光物种数。它有三个基本操作——预备、复原和变换。通过预备和复原操作只能得到没有明确物理与化学意义的抽象因子，是一种纯粹的数学解，需再通过目标检验或抽象旋转操作，将抽象的解变为有明确物理与化学意义的实际解，以获得真实的因子。

抽样 sampling 亦称取样。从欲研究的全部样品中抽取一部分样品单位。基本要求是要保证所抽取的样品单位具有充分的代表性，以便从所抽取的样品单位的分析与研究结果来估计与推断全部样品的特性，这是科学试验、质量检验、生产控制、社会调查普遍采用的一种经济而有效的研究方法与工作方式。

抽样检定 verification by sampling 从一批相同的计量器具中抽取有限数量的样品，作为代表该批计量器具所进行的一种检定。它适用于数量大、结构简单或性能可靠的且没有必要对全部产品逐个进行检定的情况。

抽样检验 sampling test; sampling inspection 又称抽样检查。从一批产品中随机抽取少量产品（样本）进行检验，应用概率统计理论由检验所得到的产品平均质量指标去估计和推断被检的该批产品（总体）是否合格的一种广泛使用的统计方法。产品质量指标是指产品的某种或某些特征，如有效成分和杂质含量、耐磨性、有效使用时间、疵点数等。根据抽样检验的目的，分为抽样控制和抽样验收。抽样控制是在生产过程中进行抽样检查，考察产品质量的变化趋势，并根据其变化趋势及时调整生产过程，预防产品质量的重大波动，因此，这种抽样检验又称为预防性抽样检验。抽样验收是对成品进行抽查，以确定已生产的产品是否合格，是一种事后抽样检验。

抽样误差 sampling error 抽样方法本身所引起的误差。当由样品总体中随机抽样时，哪些样品被抽到是随机的，由抽出的样本所得到的质量指标 x 与总体的质量指标 μ 之间的偏差，称为实际抽样误差。当样品总体很大时，可能抽取的样本很多，没有必要列出所有的实际抽样误差，而用平均抽样误差来表征各样本的实际抽

样误差的平均水平。

臭氧层破坏监测 ozonosphere damage monitoring 根据国际间臭氧层保护的有关条例，它监测各种被认为可能改变臭氧层的化学和物理特性的自然和人类来源的化学物质。它们是（1）含碳物质，如 CO、CO_2、CH_4、非甲烷烃类物质等；（2）含氮物质，如 N_2O、NO_x 等；（3）含卤素物质，如 CCl_4、$CFCl_3$(CFC-11)、CF_2Cl_2(CFC-12)、CH_3Cl、CHF_2Cl(CF C-22)、CF_3Br 等；（4）含氢物质，如 H_2、H_2O 等。

臭氧监测分析方法 ozone monitor analysis method 有化学分析法和仪器分析法两种。化学分析法是利用臭氧将硼酸碘化钾吸收液中的碘化钾氧化，释出单质碘，在波长 352nm 处进行比色测定。二氧化硫有干扰。

仪器法又分紫外光度法和化学发光法。紫外光度法 O_3 分析仪的原理是基于 O_3 分子对波长 254nm 紫外光的特征吸收，直接测定紫外光通过 O_3 后减弱的程度（I/I_0），根据朗伯-比尔定律求出 O_3 浓度。本法 O_3 分析仪设备简单，无试剂、气体消耗，灵敏度较高，适于低浓度 O_3 的连续测定，1×10^{-6} 内有良好的线性，响应很快。

化学发光法 O_3 分析仪的原理是基于 O_3 与乙烯的气相化学发光反应，产生激发态的甲醛或乙二醛，当激发态的分子返回基态时发出一定能量的光，所发出光的强度与 O_3 的浓度呈线性关系，从而测出 O_3 浓度。该法灵敏度较高，在较广的范围内有良好的线性关系。

出现能量 appearance energy; AE 在质谱中能够产生某特定离子（如分子离子，碎片离子，多价离子等）的最小能量。

出现温度 appearance temperature 在石墨炉原子吸收光谱分析中开始出现原子吸收信号的最低温度。关于出现温度的定义，文献上有三种说法：(1) 元素从原子化器表面释放进入气相的最低温度；（2）产生 0.0044 吸光度原子吸收信号所相应的温度；(3) 产生吸光度等于两倍噪声的原子吸收信号所相应的温度。它取决于被测元素的化学形态和原子化器的表面性质，也与实验条件有关。测定出现温度首先必须对炉温进行标定，其次要求仪器对检测微小原子吸收信号有足够的灵敏度和准确度，并有良好的校正背景装置以区分背景信号与原子吸收信号。它是一个重要参数，对选择合适的灰化和原子化温度有指导意义。

出血时间 bleeding time; BT 皮肤毛细血管被刺破后，血液自行流出到自行止血所需要的时间。出血时间的长短主要受血小板的数量、功能和毛细血管的结构、功能的影响。

触角载体 tentacle supports 通过线型聚合的方式，在无机物或有机聚合物基质表面嫁接上呈“触角”状的柔性聚合物链的色谱填料。对分离起实质作用的功能基团分布在伸展的柔性长链上，避免了样品分子与固定相之间的多官能团相互作用所引起的

生物聚合体的不可逆构象变化，样品分子在固定相和流动相之间的转移速率也大大加快，使色谱分辨率明显提高。触角通常是具有亲水基团的有机大分子，这种亲水性可以减小蛋白质分子与基质表面的相互作用，即减小了蛋白质的吸附。触角载体已被用于蛋白质、糖等生物大分子的分离与制备。

传递系数 transfer coefficient 又称转移系数。是对（活化）能垒对称性的量度，也是促使电化学反应得以进行所需能量 nEF（电功）的一个分配系数。它描述电极电势对阳极反应和阴极反应影响的程度。

传输干扰 transmit interference 由于传输到火焰测量区的气溶胶量的改变而引起的干扰。试液中无机盐含量的增加，引起试液黏度的增大，会使试液提升量减少，气溶胶粒度增大，分析信号减小。多数有机溶剂的黏度和表面张力比水小，它的存在使试液提升量增加，气溶胶粒度变细，导致分析信号增大。传输干扰对各元素是非选择性的，引起各元素分析信号同时增大或减小。消除干扰的常用方法是基体匹配，使作为参比的标准溶液与试液具有相同的物理性质。若难以做到基体匹配，则采用标准加入法分析试液。如果有双道原子吸收光谱仪器，可以使用内标法分析试液，以消除传输干扰。

传质过程 mass transfer processes 当电流通过电化学池时，电极和溶液界面发生电荷转换过程，消耗反应物，生成反应的产物。欲维持通过的电流值，反应物从溶液本体向电极表面方向传送，产物则从电极表面向溶液方向传送，这种物质在液相中的传送称为传质过程。

传质速度 rate of mass transfer to a surface 单位时间内所研究的物质通过垂直于电极方向的单位截面积的量。

传质速率 rate of mass transfer 单位时间内物质传递的量。在色谱过程中，溶质分子在流动相和固定相之间进行反复多次的分配以达到彼此分离。分配过程伴随着质量的迁移，由于浓度梯度的存在，溶质分子就会由浓度高的一相转移到浓度低的一相，直到两相间浓度达到平衡为止，这就是所谓的物质传递过程，由于这种传质过程是在流体中进行的，因此传质速率与流体的物理性质和流动情况等因素有关。

传质阻力 resistance of mass transfer 指在色谱过程中阻碍溶质分子在两相间瞬时达到平衡的除纵向扩散外的所有因素。例如在气-液色谱中，固定液涂渍在载体的表面和微孔，甚至深孔中，使载体表面上的固定液膜厚度不均匀，因而当溶质分子在流动相与固定相之间不断出入时，扩散所用的时间就不同，尤其载体表面有比较多的毛细深孔时，上述现象更为严重，因而溶质分子的质量传递过程受到阻碍，增加了传质阻力，使色谱峰加宽。传质阻力与流速、溶质的扩散系数、液膜厚度、载体颗粒大小，填

充情况等有关。

串联质谱法 tandem mass spectrometry; MS/MS 又称为质谱-质谱法。是利用二级（或多级）质谱进行分离的一种质谱检测技术，用来研究亚稳跃迁和碰撞活化解离进行有机化合物结构鉴定以及混合物分析的方法。由第一级质谱选择某一特定质量离子作为先驱离子（母离子），在第二级质谱中，对先驱离子裂解生成的子离子进行检测，称为子离子扫描。此外，还有母离子和中性丢失扫描方式等。

串联质谱仪 tandem mass spectrometer 将两个或两个以上质量分析器串联起来组成的质谱仪。又称为质谱-质谱仪。一般来说，串联质谱分为两大类：时间串联质谱仪和空间串联质谱。时间串联质谱仪有：离子阱质谱；傅里叶变换回旋共振质谱仪。空间串联质谱仪有：（1）扇形场型：由扇形磁场（简称 B）和电场（简称 E）组合而成，如 BE，EBE，BEE，EBEB 等；（2）三级四极型：由三组串联的四极杆（简称 Q）组成；（3）混合型：由扇形场、四极杆、飞行时间（TOF）等分析器混合配置而成，如 Q-TOF，QQ-TOF，BEQQ，QEB 等。

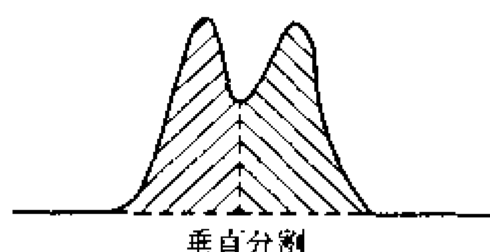
窗材料 window materials 凡能透过一定波段范围的材料都可用作该波段范围的窗片材料。在紫外区可用石英做窗片材料，在可见区可用光学玻璃做窗片材料，在红外区氯化钠、氯化银、溴化钾、氟化钙、氟化钡、碘化铯、硫化锌和高密度聚乙烯等做窗片材料。对制作红外吸收池的窗片材料的要求是易于加工，抗形变，有足够的强度和容易清洗。AgCl 可用于水溶液，但遇紫外光则变黑，NaCl 及 KBr 容易制得，却易吸水变得模糊。参见**红外窗片材料**条。

窗（口）函数处理 window function treatment 见**权函数处理**条。

垂直对称平面光栅装置 vertically symmetrical plane grating mounting 这是 Ebert 最早提出的一种平面光栅工作装置，有时也称为 Ebert 装置。其特点是入射狭缝与出射狭缝（更经常是光谱感光底版）相对于平面光栅处于上、下对称布置状态。垂直对称平面装置由于光学对称性，在构成单色仪时彗差可抵消，在构成摄谱仪时对光谱版中心的中间波长谱线彗差也可抵消，因此垂直对称平面光栅装置的光谱成像质量是较好的。这种装置的另一个优点是没有二次衍射，因而杂散光和背景强度较小。垂直对称平面光栅装置的缺点是谱线不仅弯曲而且倾斜，因而由于像散和场曲会造成明显的谱线增宽、降低光谱分辨率。在现代大多数光栅摄谱仪中，垂直对称平面光栅装置得到广泛的应用。

垂直切割法 vertical incision method 用手动或自动积分仪测量峰面积时所采用的一种近似方法。对于两个不能完全分离峰的峰面积测定，如果两相邻峰的峰高相差不大时（大约 5 倍以下），可采用自峰谷向基线作垂

线的方法将两峰分割开（如下图所示），分别积分得到两峰的峰面积。



垂直分割

垂直摇摆振动 wagging vibration 见弯曲振动条。

醇制品中的变性剂 denaturants of alcohol products 酒中含有的少量能改变其品质的其他物质，如酸类、酯类、高级醇类、醛类等。由于生产过程不合理导致的甲醇、高级醇含量过高，生产过程中添加的物质中含有锰、二氧化硫，由于设备引起的污染如铅等，以及由于原料品种不同时还含有氰化物、黄曲霉素等有害物质。

瓷过滤坩埚 porcelain filter crucibles 一种用于过滤沉淀的容器，它有一个多孔的素烧瓷底，主要用于强（浓）碱溶液的过滤，（浓）碱溶液对玻璃有腐蚀性，一般不采用玻璃过滤器。

磁比热容 magnetic specific heat 磁性物质的比热容，是磁性物质最具特征性的性质之一。常用磁比热容中的异常现象来证明和研究物质的磁有序化。一种磁有序物质，不管是铁磁体还是反铁磁体，仅在绝对零度时自旋完全有序，此时物质的熵为零。随着温度的升高，增加的热能与自旋交换能相抗争，引起磁有序程度减少，即自旋之间的相关性减小，磁系统的熵增加，也就是说磁有序程度的减少对比热应有一定的贡献。在理论上，随着温度从低于居里温度 T_c 升到趋于 T_c 的过程中，比热容平滑地增加，当温度到达 T_c 时，比热容突然下降，这是因为在温度高于 T_c 时，不再有任何磁有序出现，没有获得熵值增大。显然磁比热容会受到磁场的影响。对于短程有序的，如具有零场分裂的离子、具有磁交换作用的双聚物等，也会出现磁比热容中的异常现象。甚至在适当条件下普通顺磁物质也可能对比热容有贡献。

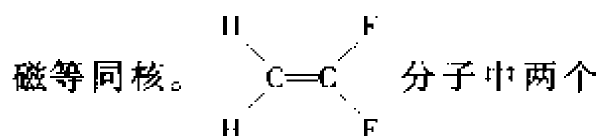
磁场偏转 magnetic field deflection 以一定速度运动的带电粒子进入磁场后，在磁场力（洛伦兹力）的作用下，其运动轨道发生偏转，作圆弧运动，称之为磁场偏转。带电粒子的质量大小不同，发生偏转的程度也不同，根据这个原理，可以将进入磁场的不同质荷比（m/z）的离子分离开。

磁场扫描 magnetic field scan 以一定速度运动的离子进入磁场后，其运动行为可以用下式描述。

$$\frac{m}{z}=4.82\times10^{-5}\frac{B^2r^2}{V}$$

式中，m 是离子质量；z 是电荷；V 是离子加速电压；B 是磁场强度；r 是离子运动圆周半径。当加速电压 V 和半径 r 固定时，改变磁场强度可获得不同 m/z 的离子，称为磁场扫描。

磁等同核 magnetic equivalent nuclei 分子中化学等同的一组核对组外任何一个磁性核都具有相同的耦合

常数，则这组化学等同核彼此磁等价，因此称为磁等同核，也称磁全同核。磁等同核必须是化学等同核，而化学等同核在大多数场合中不一定是磁等同核。分子中两个H核与两个F核都分别是化学等同核，因为通过该分子的二重轴或镜面作对称操作后，分子复元，但这两个H（或F）都是磁不等同核，因它们对指定的某F（或H）的耦合，一个处于顺式另一个处于反式，其耦合常数不等。

磁感应强度　intensity of magnetization　是在介质中的磁场强度。指给定的外加电流所产生的激励磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 与介质中被磁化物质所产生的磁场强度 $\boldsymbol{H}'$ 之矢量和：$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{H}+\boldsymbol{H}'$，其单位为高斯，在国际单位制中用特斯拉（Tesla）表示，记以T，$1T=10^4Gs$。核磁共振中所说的磁场强度是指介质中的实际磁场，即指磁感应强度 $\boldsymbol{B}$。

磁化率　susceptibility　通常磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 与磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 成正比关系 $\boldsymbol{M}=\chi\boldsymbol{H}$，比例系数 χ 叫做磁化率。大多数的各向同性物质的磁化率为常数，而各向异性物质的磁化率为2阶张量。顺磁物质的磁化率是 10^{-3} ~ 10左右的正值，反铁磁体的磁化率是10左右的负值，而铁磁体的磁化率随磁场强度而变化。顺磁物质的磁化率与温度的关系满足居里规则。

磁化强度的恢复率　magnetization recovery rate　PFT-NMR实验中核的磁化矢量在脉冲的作用后应等待一个时间，让磁化矢量恢复到原始状态，以便使核体系接受下一次脉冲的作用后仍能获得最大信号。这个等待时间（实验中就是脉冲间隔时间）取决于核的弛豫时间 T_1，不同等待时间下体系磁化强度恢复到原始状态百分率不同。在测试试样时，要根据试样中核的弛豫时间 T_1 选择合适的倾倒角和脉冲间隔时间，以便在较短时间内获得最高信噪比的图谱。

磁化矢量　magnetization vector　见**宏观磁化强度矢量**条。

磁化矢量垂直分量　vertical component of magnetization　见**磁化矢量平行分量**条。

磁化矢量平行分量　parallel component of magnetization　磁场中核自旋体系处于热平衡态时，体系磁化矢量为 $\boldsymbol{M}_0$，它顺着或平行于磁场 z 轴方向，记为 $\boldsymbol{M}_z=\boldsymbol{M}_{//}=\boldsymbol{M}_0$。当核自旋体系受到某种外界作用，如射频场作用，磁化矢量随即偏离其平衡位置（z 方向），这时 $\boldsymbol{M}_z=\boldsymbol{M}_{//}<\boldsymbol{M}_0$。$\boldsymbol{M}_z$ 是 $\boldsymbol{M}_0$ 在 z 轴上的投影。这个磁化矢量分量平行于磁场方向也称为磁化矢量平行分量 $\boldsymbol{M}_{//}$。而 $\boldsymbol{M}_0$ 在垂直于 z 轴的 xy 平面内的投影便称为磁化矢量垂直分量 $\boldsymbol{M}_{\perp}$。自旋体系处于平衡态时各个核自旋的进动相位是无关的，所以 $\boldsymbol{M}_{\perp}=0$。当离开平衡位置时，$\boldsymbol{M}_{\perp}\neq 0$。此时核自旋的进动具有特定的相位，并且它将按横向弛豫时间 T_2 变化。因此 T_2 有时也称为自

旋-自旋相位记忆时间。

磁化转移 magnetization transfer 单量子相干之间的转移，称为磁化转移。参见**相干转移**条。

磁量子数 magnetic quantum number 描述微观粒子在外加磁场下行为的基本物理量，以 m 表示。在外加磁场下微观粒子的轨道角动量和自旋角动量具有各自特定的方向，即在外磁场 z 方向上的投影只能取一些不连续的数值 m，m 即为磁量子数。

轨道角动量的分量 $L_z = m\hbar$，$m = l, l-1, \cdots, -(l-1), -l$。取 $2l+1$ 个值，其中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$。

自旋角动量的分量 $S_z = m_s\hbar$，$m_s = +\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}$。取两个值。下标 s 标记电子的自旋运动。

核自旋角动量的分量 $P_z = m_I\hbar$，$m_I = I, I-1, \cdots, -(I-1), -I$。取 $2I+1$ 个值。下标 I 标记核的自旋运动。

磁偶极子 magnetic dipole 电子绕原子核的运动会产生轨道磁矩。电子、质子、中子等基本粒子以及各种原子核具有自旋运动，会产生自旋磁矩。这些磁矩的线度本身很小，因此实际上它们就像一个具有南北极的磁子一样，核磁矩、电子磁矩都是这样的磁子，称为磁偶极子。

磁天平 magnetic balance 用于测定弱磁性体的磁化率（χ）和磁化强度（M）的实验仪器。一般情况下，特指法拉第天平。其基本原理是：用电磁铁产生沿竖直方向（z 方向）具有梯度的磁场 H（磁场自上而下逐渐变强），磁天平的一臂放有砝码，另一臂用细线将样品挂在下端，放入梯度磁场中进行称量。如磁场强度为 H，磁场梯度为$\frac{dH}{dz}$，样品的体积为 v，向下拉样品的作用力则为 $\frac{1}{2}v\chi\frac{d(H^2)}{dz}$，若 M 与磁场无关，则该值与 $v\frac{d(\vec{M}\cdot\vec{H})}{dz}$ 相等。如用磁天平测定这个力的大小，就能算出 χ 和 M。

磁通稳定器 flux stabilizer 由拾磁线圈、磁通放大器和补偿线圈 3 部分组成。绕有 N 匝的拾磁线圈，放在两磁极之间，当磁场发生变化时会产生感生电动势 ε，它正比于线圈匝数 N 及通过线圈的磁通量对时间的变化率$\frac{d\phi}{dt}$。这个感生电动势由磁通放大器经差分放大后分成两路，一路加到补偿线圈上，产生一个变化方向相反的磁场，用以抵消这个磁场的变化；另一路则施加到磁铁电源的稳流器上，用以调整磁铁电流，从而实现完全补偿。对于磁场起伏较大的快变化，磁通稳定器能起很好的稳定作用，通常可将磁场稳定度提高 2 个数量级，达到 $10^{-8} \sim 10^{-9}$ 数量级。对于磁场起伏较小的慢变化和漂移则需要用场-频联锁装置。

磁性饱和 magnetic saturation 铁磁质的基本组成部分是磁畴。各个磁畴中，原子磁矩的排列自发倾向于平行，因而具有磁性。但各磁畴的排列

方向则是混乱的，因此在没有外加磁场时或未磁化前，尽管各磁畴具有磁性，铁磁体中整体对外不显磁性。在外磁场作用下，各磁畴的磁化方向与外磁场方向趋于一致，从而使磁感应强度得以增强。随着外场增强，磁畴的磁化方向也越趋接近外磁场方向，最终，所有磁畴都转到与外磁场一致的方向，磁感应强度达到最大值，此后再增强外磁场，磁感应强度已不再增大，这种现象称为磁性饱和。电磁铁的核磁共振仪通常其磁体的强度使质子共振频率限于100MHz，与铁磁体的磁性饱和直接有关，若要再提高磁体的场强应采用超导磁体。

磁性核的相对可接受度 relative receptivity of magnetic nuclei 粗略地划分NMR中研究磁性核难易程度的标志。在固定外磁场强度时，NMR信号强度正比于$\gamma^3 NI(I+1)$，N为某核素X的天然丰度，I为核自旋量子数。因此，可以^{1}H(p)和^{13}C(C)为标准，定义两种可接受度

$$D_X^P = \left|\frac{\gamma_X}{\gamma_p}\right|^3 \cdot \frac{N_X I_X(I_X+1)}{N_p I_p(I_p+1)}$$

和 $$D_X^C = \left|\frac{\gamma_X}{\gamma_C}\right|^3 \cdot \frac{N_X I_X(I_X+1)}{N_C I_C(I_C+1)}$$

人们可按N分成三类：丰核（$N>90\%$），中等核（$10\% < N \leq 90\%$），稀核（$N \leq 10\%$）。也可按磁旋比γ分为三类：磁性强核$\left(\frac{|\gamma|}{10^7}>10\right)$，磁性中等核$\left(2.5<\frac{|\gamma|}{10^7}\leq 10\right)$，磁性弱核$\left(\frac{|\gamma|}{10^7}\leq 2.5\right)$。在NMR中，$I=\frac{1}{2}$的核一般较$I>\frac{1}{2}$核容易研究，因为$I=\frac{1}{2}$核的电四极矩为0，一般谱线较窄。在$I=\frac{1}{2}$的核素中，强磁性的丰核是^{1}H、^{19}F、^{31}P是最易研究核，而弱磁性稀核研究最困难。对于$I>\frac{1}{2}$的核则由于核电四极矩的影响，强烈地依赖于核所在分子中的环境，对称性高的核，线宽可能较窄，较易研究，否则谱线可能大为加宽而难于研究。

磁性强核 strong magnetic nuclei 在核磁共振中磁旋比γ相对比较大的磁性核素。磁性强核的相对可接受度比较大，因此较容易研究，最常见的磁性强核的核素有^{1}H，^{19}F，^{31}P等。参见**磁性核的相对可接受度**条。

磁性弱核 weak magnetic nuclei 在核磁共振中磁旋比γ相对比较小的磁性核素。磁性弱核的相对可接受度比较小，因此较难研究，最常见的磁性弱核的核素有^{33}S，^{67}Zn，^{57}Fe，^{97}Mo，^{187}Os等。参见**磁性核的相对可接受度**条。

磁性微球分离技术 separation technology with magnetic micro-beads 近年来发展起来的一种新分离技术。它是将起捕捉作用的生化物连接于磁性微球上，同时，利用该生化物与被测样品中另一生物分子之间特异性与专属性相互作用，如配体、受体相互作用，抗体、抗原相互作用以及DNA之间的杂交作用等，将要分离

或富集的分子捕捉到磁性微球上，再通过磁性分离以达到分离纯化之目的，用于细胞分离，基因操作、免疫分析及固定化酶等诸多领域。磁性微球的制备，通常是由滴加 NH_3 水或 NaOH 至 Fe^{2+} 和 Fe^{3+} 溶液中，生成 $Fe_3O_4 \cdot xH_2O$ 晶体，此晶体经加热熟化之后，制成具有软磁性的 Fe_3O_4。控制温度、pH 值及 Fe^{2+}/Fe^{3+} 的比例。可获得几纳米至几微米的磁性微粒。此种微粒可以直接与生物分子连接。也可以通过包复一层聚合物外壳并进行表面功能化，然后再与生物分子连接。通常表面功能化基团为氨基、环氧基、醛基或羧基。在适当催化剂存在下，这些功能化基团可与生物分子中氨基连接。包复聚合物的磁性微球通常可较好地悬浮于反应体系中，以便捕捉被测样品中生物分子，又因其具有软磁性，加入外加磁场后便可迅速与液相基体分离，再进行下一步的检测。

磁旋比 gyromagnetic ratio 也称回磁比，旋磁比。微观粒子某种运动所产生的磁矩与其角动量之比，记以 γ，其量纲为 $rad \cdot T^{-1} \cdot s^{-1}$。电子轨道磁旋比

$$\gamma_l = \frac{\mu_l}{l} = -\frac{\beta_e}{\hbar}$$

式中，μ_l 为电子轨道磁矩；l 为电子轨道角量子数；β_e 为玻尔磁子；$\hbar = \frac{h}{2\pi}$。电子自旋磁旋比 $\gamma_s = \frac{\mu_s}{s} = \frac{-2\beta_e}{\hbar}$，$\mu_s$ 为电子自旋磁矩；s 为电子自旋量子数。电子总磁旋比

$$\gamma_e = \frac{\mu_e}{J} = -\frac{g_e\beta_e}{\hbar}$$

式中，μ_e 为电子总磁矩；J 为电子总角量子数。电子磁矩与角动量方向相反，习惯上以角动量方向为正，故磁矩 μ_e 为负，电子磁旋比 γ_e 为负。

核磁旋比 $\gamma_N = \frac{\mu_N}{P} = \frac{g_N\beta_e}{\hbar}$，是核的基本特性。其中 μ_N 是核的自旋磁矩，P 是核的自旋角动量，g_N 是核的核朗德因子。它取决于原子核内部的结构与组成它的基本粒子质子、中子等。不同核素的 γ_N 各异，且有正有负，大多数核为正值。如 $^1H(p)$ 为 26.7519（$10^7\ rad \cdot T^{-1} \cdot s^{-1}$ 为单位）。

磁圆二色吸收 magnetic circular dichroic absorption；MCDA 磁圆二色性与磁致旋光一样都是源自塞曼效应。在磁场中，分子的基态或（和）激发态的简并被解除，使左圆偏振光和右圆偏振光的共振吸收频率不同，从而使它们的吸收曲线和色散曲线相互错开。这导致两种效应：一是使通过介质的平面偏振光的偏振面旋转，产生法拉第效应（磁致旋光）；二是使介质对一定频率的左圆和右圆偏振光的吸收率不同，产生磁圆二色性。两种效应总是同时出现，但法拉第效应对所有波长的光都存在，而磁圆二色性只在吸收峰附近才显示出来。磁圆二色吸收就是测定物质分别吸收一定频率的左圆和右圆偏振光时的吸光度之差或吸收系数之差。因为磁圆二色吸收测量的是吸光度（或吸收系数）

的差值，具有很高灵敏度，用普通的吸收光谱方法无法分辨的塞曼裂分，可以用磁圆二色吸收谱来研究。

磁致旋光 magnetic optical rotation; MOR 如果磁场中的物质是透明的，它将使平行于磁场入射的线偏振光的偏振面发生旋转，这就是磁致旋光，也称为法拉第效应。旋转角 α 与透明材料的性质、长度 l 及磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 有关，它们之间的关系可表示为 $\alpha=\rho l\boldsymbol{H}$，式中，$\rho$ 称为费尔德常数，它是由材料的性质决定的。因此利用这个关系，可以根据测定通过光的偏振面旋转角来测定磁场。对于铁磁性金属薄膜，用磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 代替磁场强度 $\boldsymbol{H}$，上面的关系式仍然成立。磁致旋光与自然旋光不同，即使光的入射方向相反，旋转方向不发生变化。因此入射光在介质中反射后，反射光的旋转角变为 2α。参见**磁圆二色吸收**条。

次级电子 secondary electron; SE 在入射电子的作用下，从固体样品中出射的，能量在 0~30eV 的电子。主要来自样品表面层下部 0.5~5nm 深度之间，其最大特点是对样品的表面状态敏感，无阴影效应，形貌分辨率好以及像的空间分辨率高。次级电子的组成比较复杂，有能量损失的俄歇电子，也有经非弹性散射损失能量的各种电子。利用次级电子可以进行样品的表面形貌观察，即次级电子像。

次级电子检测器 secondary electron detector 电镜中信号检测放大系统的一部分。其作用是检测样品在入射电子作用下产生的次级电子信号，然后经视频放大，作为显像系统的调制信号。通常采用闪烁计数器，检测器置于样品上侧。

次级电子像 secondary electron image 用电子束对样品表面的某一区域进行扫描，同时用探测到的次级电子信号调节与上述扫描同步的阴极射线管的亮度，得到样品的表面形态的显微图像。表面粗糙度可以引起次级电子产率的差异，从而产生次级电子像的衬度。

次级离子质谱 secondary ion mass spectrometry; SIMS 利用初级离子来轰击样品表面，使得样品表面的部分原子离子化形成次级离子，再用质谱仪来测量从靶上射出的次级离子质荷比的技术。次级离子质谱测量的是粒子质量，因此可以分析所有的元素。由于离子化过程的复杂性和重复性差异，次级离子质谱的定量很困难。但由于质量的惟一性，其定性分析比较容易，并具有很高的检测灵敏度，是目前最灵敏的表面分析手段。根据所使用的技术差别可分为动态次级离子质谱法、静态次级离子质谱法和次级中性粒子质谱法。次级离子质谱法主要用于金属、陶瓷和半导体材料等固体样品的表面微区和一定深度的成分分析，也可用来分析有机物。在测定有机化合物时，通常将样品与液体基质（如甘油等）混合，再用一次离子碰撞，使样品离子化，故又称为液体次级离子质谱法。

次级 X 射线荧光 secondary X-ray

fluorescence 以能量足够高的X射线照射样品而激发出的X射线荧光称为次级X射线荧光。记录和分析次级X射线荧光光谱，以测定样品化学成分的分析方法，称为次级X射线荧光光谱法。

次级X射线荧光光谱法 secondary X-ray fluorescence spectrometry 以X射线照射样品，记录和分析所产生的次级X射线荧光光谱，以测定样品化学成分的分析方法。入射的X射线既可以是单色的特征谱线以激发样品中特定元素指定谱系的特征谱线；也可以是多色的连续光谱以激发同一样品中的不同元素。与使用电子束的原级激发方式相比，这种激发方式具有以下优点：样品不受玷污；样品状态不受限制，各种块状、粉末或液体等均可直接测定；不涉及高真空操作，故使用方便，分析速度快，适合于大量样品的例行分析；因韧致辐射引起的本底荧光强度低，具有较高的峰背比。因而常规的X射线荧光光谱分析几乎都采用这种激发方式。

粗纤维测定 determination of crude fiber 用热的稀硫酸水解除去样品中的糖、淀粉、果胶和半纤维素等，再用热氢氧化钾除去蛋白质、脂肪，然后用乙醇或乙醚除去单宁、色素及残余的脂肪，所得的残渣为粗纤维素，无机物含量可经灰化后扣除。此法为粗纤维含量测定的标准方法。在测定过程中，由于碱洗造成纤维素、半纤维素、木质素等的降解，使得测定结果的重现性差，回收率只有50%～80%，为此提出膳食纤维素的概念。膳食纤维素包括构成细胞壁的多糖类和非构成成分的果胶质、橡胶质、黏质等，可用Van Soest法分别测定中性洗涤纤维（NDF）、酸性洗涤纤维（ADF）、ADF-木质素，也可用Southgate法依次测定淀粉、水溶性非纤维素、水不溶性纤维素（主要是半纤维素）、纤维素、木质素，方法较理想，但是速度很慢。参见Southgate改良法条。

粗脂肪测定 determination of crude fat 食品中的脂类主要指脂肪（甘油三酸酯）和一些类脂，包括脂肪酸、磷脂、糖脂、甾醇、固醇等。脂肪的测定方法很多，有索氏抽提法、酸水解法、罗紫-哥特里法、巴布科克氏法、盖勃氏法、氯仿-甲醇提取法、直滴式抽提法、煮浸抽提法、残余物质量法、皂化法、密度法、折射法、电测法、近红外光谱法（AOAC）、核磁共振法等。可采用低沸点有机溶剂直接提取游离脂肪，用酸碱溶液破坏碳水化合物和蛋白质，用溶剂提取结合态脂肪，最常用的提取溶剂是乙醚、石油醚或氯仿-甲醇。用低沸点有机溶剂提取时，除各种甘油酯外，还有挥发油、苹果酸、酒石酸和柠檬酸等有机酸、蜡状物、磷脂、固醇、色素、脂溶性维生素A、D、E、K、醛和酮等多种杂质都被提取出来，所以称为“粗脂肪”。

猝灭室温磷光法 quenched room temperature phosphorimetry; Q-RTP 是与敏化室温磷光法相反而又互为补

充的一种流体室温磷光分析法。它是利用分析物（猝灭剂）与某种发光体（如联乙酰）的激发三线态作用，根据对其 RTP 发射所产生的猝灭程度来实现分析物的定量测定的。被猝灭的可以是发光体本身的 RTP 信号，也可以是所产生的 S-RTP 信号。

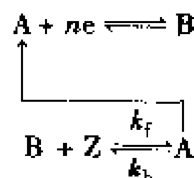
簇 cluster 由两个以上有限个原子或分子形成的集合体，是构成超分子结构单元的一种，大小介于原子、分子和固体结晶之间。多个原子或分子由于种种原因形成簇，如由范德华力形成的分子簇、金属簇、碱金属卤化物等无机化合物簇等。根据结构的不同，还有存在于层状分子层间的分子原子簇、被包结在 3 维晶格中的包结型簇等。带有电荷的簇则称为离子簇。

簇轰击电离 massive-cluster impact ionization；MCI 质谱分析中，用 10～20kV 电压将粒径大小为 0.01μm、质量在 10^7 以上的亚微细粒与质子附加数在数十至数百的丙三醇多价簇离子加速，轰击涂有液体基质样品靶板，从而使样品离子化，样品制备法与快原子轰击电离相同。参见**快原子轰击电离**条。

簇离子 cluster ion 质谱图中一类离子的统称。数个分子 M 或者原子 A 及 B 以弱化学键形成的有限体系称为簇群，例如 M_n，A_n，A_nB_m（n，$m \geqslant 2$）等。带有电荷的簇群称则为簇离子，例如，M_n^+，M_n^-，$[M_n+H]^+$，$[M_n-H]^-$ 等。

催化发光 catalyzed chemiluminescence 在具有催化活性的材料表面发生催化反应而产生的发光。如一氧化碳在二氧化钍表面作用时可观察到强烈的催化发光现象。最近发现一些纳米材料具有强烈的催化发光作用，据此可设计以纳米材料为敏感元件的催化发光传感器。

催化反应 catalytic reaction 电极反应物通过一平行的化学反应再生，电极表面的反应物由扩散和化学反应共同提供，极限电流大于扩散控制的电流的反应。其催化过程可表示为



式中，Z 为参加化学反应而无电极反应的物质；k_f，k_b 为正、反向化学反应速率常数。

催化氢波 catalytic hydrogen wave 由于氢离子在汞电极上有很大的超电位，某些物质能加速氢离子的放电，即能降低氢的超电位，使氢离子在比正常氢波为正的电位下还原，形成催化氢波。催化氢波的灵敏度比较高，一般可达 10^{-6}～10^{-8} mol·L^{-1}，有时可达 10^{-9}～10^{-10} mol·L^{-1}；选择性比较好；往往具有吸附性，极谱波常呈峰形。可用于无机离子和有机化合物的测定。

催化色谱法 catalytic (gas) chromatography 是指以反应器作为色谱柱的一种气相色谱法。用催化剂代替色谱柱中用于分离的固定相，以脉冲方式将反应物引入载气流或直接以反

应物作流动相，利用所得到的色谱图对反应物和产物进行定性和定量分析。目的是研究催化反应的基元步骤、物质的吸附、催化反应过程、反应程度和反应动力学等。用于催化剂和载体表面性质研究及催化反应物分析的色谱方法，不属此列。

催化褪色分光光度法 catalytical discoloring spectrophotometry 一种基于被测组分对某个褪色反应的催化作用（加速、或抑制褪色过程），利用一定条件（温度、反应时间等）下加入被测组分前、后吸光度的差值与被测组分含量的关系进行测定的方法。例如，利用氢氧化钠介质中，钴（Ⅱ）能催化过氧化氢氧化5-溴水杨基荧光酮而使其褪色的性质，可用于痕量钴的测定。

萃淋树脂 elution-extracting resins 是以苯乙烯-二乙烯苯为骨架，且基本上是大孔结构，并含选择性萃取剂的共聚物的总称。与溶剂浸渍树脂的不同之处在于：其制作方法是基于悬浮聚合原理，即将萃取剂先加在苯乙烯和二乙烯的单体混合物中，然后聚合成球。二乙烯苯交联剂单体在混合物中占5%～10%左右。至于萃取剂，可用液态磷酸酯类和脂肪胺类，也可以用几种萃取剂的混合物，如三丁基氧膦和三辛基氧膦。它是大孔结构，每一粒萃淋树脂是由许许多多微珠球相互牢固地联结而成，微珠球之间的空隙被吸附的活性物质（萃取剂）所充满，堆密度比较低（约630g·L^{-1}），且真密度也比普通离子交换树脂低（约1.0g·cm^{-3}），活性物质的量通常为25%～50%。因为萃取剂是疏水的，所以这种树脂的含水率很低（小于0.3%）。萃淋树脂对金属离子的选择性主要取决于所含的萃取剂。它的优点是分离效果好，分离速度快，操作简单，价格比螯合树脂（如DowexA1）便宜，不存在液-液萃取时发生的乳化现象，树脂可重复使用。其用途为：除去痕量有毒金属、放射性离子、浓度很低的离子，分离高浓度的溶液以及将金属离子的盐转型（如用硫酸作淋洗剂，能使氯化锌变为硫酸锌）。已用于铀、锌、钚、铜、铁、钒、铬、钢和重稀土的分离。

萃取催化动力学光度法 extraction-catalytical kinetic spectrophotometry 将萃取分离与催化动力学分光光度法结合起来的一种光度测量方法。即利用萃取技术先分离、富集被测组分，然后基于它对某个显色反应的催化作用（加速、或抑制显色过程），利用一定条件（温度、反应时间等）下，在显色体系中加入被测组分前、后吸光度的差值与被测组分含量的关系进行测定的方法。

萃取分配系数 extraction distribution coefficient 又称分配比。被萃取物A在两相中的总浓度之比值，常以D表示。

$$D=\frac{c_{org(总)}}{c_{aq(总)}}=\frac{[A_1]_{org}+[A_2]_{org}+\cdots+[A_i]_{org}+\cdots}{[A_1]_{aq}+[A_2]_{aq}+\cdots+[A_i]_{aq}+\cdots}$$

式中，$[A_i]$ 表示 A 的第 i 种型体的浓度。分配比随体系条件，如被萃取物浓度、萃取剂浓度、溶液酸度、杂质浓度等因素而变化。

萃取浮选法 extraction floatation 利用在一定条件下，金属离子与某些有机络合剂形成疏水又疏溶剂的沉淀，可以浮选于某些有机溶剂液面而形成第三相或附着于分液漏斗壁，经弃去水相、分出第三相而实现分离富集的方法。主要用于络合物组成的研究、废水处理、贵重试剂的回收等。

萃取光度法 extraction spectrophotometric method 将萃取分离与光度测定相结合的一类分析方法。可用于某些无机离子的测定。由于大多数无机离子在紫外-可见光区无吸收，通常通过加入能够显色的有机试剂与无机离子形成螯合物并萃取到适当有机溶剂中，然后用分光光度法进行检测；或是直接利用配制在有机溶剂中的显色剂与含被测元素的水溶液反应，即将显色反应与萃取同时进行，分相后对有机相进行分光光度测定的一类分析法。如硫脲法测铋，双硫腙法测铅，邻苯二胺法测硒等。该法的主要优点是：由于将被测物质从体积较大的水相转移到体积较小的有机相，具有富集作用，可提高分析的灵敏度；合适条件下，可实现样品中被测元素与干扰元素的分离，提高分析的选择性。由于带电荷的化合物不易进入有机溶剂中，金属离子必须转变为不带电荷的配合物，或与带相反电荷的离子形成离子（对）缔合物后才能被萃入有机相。

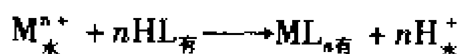
萃取剂 extractant 能与亲水性物质发生化学反应，生成可被萃取的疏水性物质的试剂。通常是有机试剂，根据它们与被萃取物质发生反应的特性主要可分为螯合型和离子缔合型两类。前者如 8-羟基喹啉、二硫腙等，它们能与金属离子形成不带电荷的螯合物，增加其在有机溶剂中的溶解度；后者如乙醚、罗丹明 B 等。能与金属的络离子形成疏水的电中性离子缔合物，随后被有机溶剂萃取。不论哪种类型，其所具有的疏水基团越多，与被萃取物形成的化合物越稳定，则越有利于萃取分离。

萃取率 percentage extraction 指萃取过程中进入有机相中的被萃物的量占两相中金属被萃物总量的百分值，常用符号 E 表示。

$$E=\frac{DV_o}{DV_o+V}\times100\%$$

式中，D 为分配系数；V_o 为有机相体积；V 为水相体积。E 的大小决定于分配系数 D 和两相体积比 $\frac{V}{V_o}$，D 愈大，$\frac{V}{V_o}$ 愈小，则 E 愈高。当 $V=V_o$，则 $E=\frac{D}{D+1}\times100\%$。

萃取平衡常数 extraction equilibrium constant 对螯合物萃取体系



$$M^{n+}_{水}+nHL_{有}\longrightarrow ML_{n有}+nH^+_{水}$$

反应的平衡常数，即萃取平衡常数 K_{ex} 为

$$K_{ex}=\frac{[ML_n]_{有}[H^+]^n_{水}}{[M^{n+}]_{水}[HL]^n_{有}}$$

$$= \frac{K_{D(ML_n)}\beta_n}{(K_{D(HL)}K_{HL}^{H})^n}$$

式中，$K_{D(ML_n)}$、$K_{D(HL)}$ 分别为螯合物 ML_n、螯合剂 HL 的分配系数；β_n 为螯合物 ML_n 的累积形成常数；K_{HL}^{H} 为螯合剂 HL 的质子化常数。

萃取色谱法 extraction chromatography 将具有配位或螯合能力的萃取剂浸渍或键合在支持体上作为固定相，以无机酸、碱或盐的水溶液作为流动相，利用待分离物质在两相中连续多次的分配而获得分离的一类色谱方法。分离过程中离子性溶质因与固定相中的配位或螯合基团作用，由水相（流动相）转移到有机相（固定相），并伴随有配合物的形成及溶剂化作用等化学过程。萃取色谱是配合物液液分配色谱的一种特殊形式，它与离子交换色谱互相补充，在复杂体系的分离中联合使用，在分离和富集痕量元素等方面得到了广泛应用。

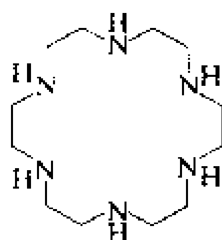
萃取阻抑动力学光度法 extraction-inhibition kinetic spectrophotometry 将萃取分离与阻抑动力学分光光度法结合起来的一种光度测量方法。即利用萃取技术先分离、富集被测组分，然后基于它对某个显色反应的抑制作用，利用一定条件（温度、反应时间等）下在显色体系中加入被测组分前、后吸光度的差值与被测组分含量的关系进行测定的方法。

存储稳定性试验 storage stability test 一般指农药制剂在指定高温或低温条件下检测制剂含量及其主要理化性质的稳定性。存储稳定性是农药产品标准和农药登记的重要资料。

错配 mismatch; mispairing DNA 分子中发生的碱基配对差错。按正确配对与错配之间自由能的差异推算，错配率可达 10^{-2}，但由于存在校正系统，使错配频率降低至 10^{-11}。一般来说，每次 DNA 复制时自发错配率在 $10^{-7} \sim 10^{-11}$之间。

D

大环多胺 macrocyclic polyamine 将冠醚环中的氧原子全部用氮取代就是大环多胺，如图所示。根据软硬酸碱理论，大环多胺对过渡金属离子显示较高的识别能力。



大环化合物色谱 large ring compound chromatography 以大环化合物作固定相的液相色谱法。通常是将冠醚、环糊精等大环化合物键合或包覆在适当的固体基质上作固定相。

大孔树脂 macro-reticular resin 又称全多孔树脂。是网状骨架结构中既存在小于 5nm 的微孔，又存在大于 5nm 乃至数十纳米大孔的树脂。它是在聚合反应过程中加入惰性溶剂，此惰性溶剂对共聚物具有惰性，而对单体苯乙烯和二乙烯基苯又具有良好的溶解性。在聚合过程中，由于惰性溶剂的存在，形成的共聚物颗粒内会产生相分离，最终在树脂骨架内形成大孔结构。体积较大的分子也能进入树脂的孔结构内部而接近离子交换树脂的功能基，适合大分子的分离。其交换容量既可以很低，也可以很高。

大孔填料 macro-reticular packing material 又称全多孔型填料。参见**全多孔型填料**条。

大米品质评价 evaluate of rice character 大米的品质除了杂质、损伤粒、黄粒、破碎粒含量多少和碾白程度以外，还与营养品质和米饭食用品质有关。从白米的蛋白质含量来说，早籼米的含量为（8.41 ± 0.48)%，而粳米的含量为（6.65 ± 0.20)%，即籼米的蛋白质含量要比粳米高。但是，大米的蒸煮食用品质则粳米优于籼米，原因是粳米的直链淀粉比早籼米低，前者为（23.4 ± 0.5)%，后者为（32.4 ± 1.5)%。

大内径毛细管柱 megabore column 主要是指内径为 0.53mm 的弹性石英毛细管柱。柱内径增加，柱容量增加，但柱效大幅度下降。可直接取代填充柱，利用其固定液液膜比较厚的特点（约为 5 ~ 8μm），可以实现不分流进样。分析速度快，吸附性小，化学稳定性和热稳定性以及柱效都大大优于填充柱。

大气暴露试验 atmospheric exposure test 将试样暴露于自然大气环境中的腐蚀试验。

大气采样 air sampling 采集大气中污染物的样品或受污染空气的样品。大气采样是大气环境监测的重要步骤，对于监测数据的可靠性关系极大。采集大气样品的方法，主要有两类：一类是使大量空气通过液体吸收剂或固体吸附剂，以吸收或阻留污染物，富集原来大气中浓度较低的污染

物，如抽气法、滤膜法。另一类是用容器采集含有污染物的空气。上述第二类方法适用于下述情况：（1）大气中污染物的浓度较高；（2）测定方法的灵敏度较高；（3）不易被液体吸收剂及固体吸附剂吸附的污染气体和蒸气。

大气采样器 air sampler 采集大气污染物或受到污染的大气的仪器或装置。大气采样器种类很多。按采集对象可分为气体（包括蒸气）采样器和颗粒物采样器两种；按使用场所可分为环境采样器、室内采样器（如工厂车间内使用的采样器）和污染源采样器（如烟囱采样器）。此外还有特殊用途的大气采样器，如同时采集气体和颗粒物的采样器，可采集大气中二氧化硫或氟化氢及其颗粒物等，便于研究气体和固体物质中硫和氟的相互关系。还有采集空气中细菌的采样器。

大气监测 atmospheric monitoring 又叫大气污染监测。是对大气（空气）中污染物的来源、分布、数量、动向、转化和消长规律等进行监测，为消除危害，保护和改善空气质量和促进生产建设，发展科学技术和保障人民健康提供可靠的科学资料。大气污染监测工作一般可分为三类。一是污染源的监测，如烟囱、汽车排气口的检测。了解这些污染源所排出的有害物质是否符合现行排放标准的规定。二是环境污染监测，监测对象不是污染源而是整个大气。目的是了解和掌握污染情况。三是特定目的的监测，它要求选定某一种或多种污染物进行特定指标的监测。

大气污染常规分析指标 index of routine analysis for atmospheric pollution 对一个地区的大气质量水平、发展趋势以及污染的排放控制等状况进行定时定点重复监测的项目。大气污染常规分析的指标是根据国家颁发的《中华人民共和国环境保护法》和《中华人民共和国大气污染防治法》和主管部门结合当地的实际情况确定的。从1996年10月1日起，我国颁布了《环境空气质量标准》GB 3095—1996新标准，大气污染常规分析的指标有二氧化硫、总悬浮颗粒物、氮氧化物、臭氧、一氧化碳、苯并［a］芘、铅和氟化物。

大气污染的生物监测 biological monitoring for atmospheric pollution 用生物对大气污染物的反应，监测有害气体的成分和含量以了解大气环境质量状况。大气污染的生物监测包括动物监测和植物监测。动物监测一般能起到指示环境污染的作用，如金丝雀对二氧化硫最敏感，其次是狗，再次是家禽；但由于动物对环境的趋性和管理困难，目前尚未形成一套完整的监测方法。利用植物监测大气污染，在20世纪初就引起生态学家的注意，如根据指示植物受害症状确定大气污染，根据叶片中含污量估测环境污染程度等。

大气污染化学 atmospheric pollution chemistry 环境化学的组成部分。主要研究环境污染物在地球大气中的

迁移转化规律。它的研究内容包括污染物在大气中的来源、扩散、分布、循环、形态、反应、归宿等各个环节。它的研究目的是为环境质量评价、分析监测和控制治理等方面的工作提供依据。

大气污染监测 atmospheric pollutants monitoring 测定大气中污染物的种类及其浓度，观察其时空分布和变化规律的过程。大气污染监测的目的在于识别大气中的污染物质，掌握其分布与扩散规律，监视大气污染源的排放和控制情况。目前已确认的大气污染物有100多种，这些污染物以分子状和粒子状两种形态分布于大气中。分子状污染物主要有硫氧化合物、氮氧化物、一氧化碳、臭氧、卤代烃、碳氢化合物等。粒子状污染物主要有降尘、总悬浮微粒、飘尘等。由于大气污染与气象条件密切相关，因而在大气污染监测中应包括风向、风速、气温、气压、太阳辐射强度、相对湿度等气象参数的测定。大气污染监测是大气质量监测的基础。

大气污染连续自动监测系统 atmospheric pollution continue automatic monitoring system 对城市或地区的大气质量进行连续、自动的采样和测定，并对测定的数据进行传输和处理的实时监测网。大气污染连续监测系统是由若干个固定监测站，一个监测中心和数据通信系统三部分组成。各固定监测站的布局可按几何图形（如方格坐标）平均布点，也可按城市功能分区随机布点。固定监测站设置的密度取决于城区污染程度、污染面积、人口数量、气象条件、地形地貌等因素，每个固定监测站内设有采样装置、各种污染物浓度连续自动监测仪器和气象参数测定仪等。监测站的测定项目是由监测系统设置的任务决定的。通常监测的项目有二氧化硫、飘尘、一氧化碳、氮氧化物、臭氧、总烃及风向、风速、温度、湿度、日照等（见**大气污染常规分析指标**条）。各监测站连续测出的污染物浓度和气象数据，经数据通信系统定时地（例如每5分钟一次）遥传至监测中心。监测中心设有计算机和各种外围设备，执行数据收集（汇集各个监测站的各项实时数据）、数据运算（计算时平均、日平均、月平均浓度，最大值、最小值、超标数等）、数据显示（打印作表、绘制污染图形及CRT直接显示等）的功能，并且执行向各监测站发出各种指令（开机、停机、校正仪器的零点及跨度等）和向各污染源、行政管理部门发出警报等功能。大气污染连续自动检测系统的组成除设有固定监测站外，有的设有流动监测站，以补充固定站的不足，并设置垂直监测站，监测气象因素和污染物的垂直分布，以了解远距离污染物的迁移情况。

大气污染物标准指数法 atmospheric pollutants standard index; PSI PSI指数包括CO、NO_2、SO_2、氧化剂O_3和可吸入颗粒物（TSP）5个参数，以及SO_2和TSP浓度的乘积。各污染物的分指数与浓度的关系采用分

段线性函数。已知污染物的实测浓度后，可按分段线性函数关系用内插法计算各分指数。也可将数据绘成分段直线，由实测浓度在图上直接查得PSI指数。选择各分指数中的最高值向社会报告空气质量。PSI将空气质量分成五级，0～50为Ⅰ级，空气质量为优，51～100为Ⅱ级良好，101～200为Ⅲ级轻微污染，201～300为Ⅳ级重污染，301～500为Ⅴ级严重污染。

大气污染遥感 remote sensing for atmospheric pollution 采用遥感技术监测大气污染，可以在较短的时间内获知大范围的大气污染状况。采用遥感技术可以对全球性大气污染状况和一个国家、一个城市的大气污染程度及其对生态的影响做出估价。从大气底层的航空遥感到几百公里高度的航天遥感都能对大气污染进行监测并取得观测资料。遥感监测大气污染能测定硫氧化物、氮氧化物、光化学氧化剂、颗粒物、一氧化碳和碳氧化合物等，但在卫星上不能测定低层大气的颗粒物含量。大气污染遥感所使用的仪器有气体滤光分析仪、红外干涉仪、可见光辐射偏振仪和激光雷达等。

大气污染源 atmospheric pollution sources 造成大气污染的污染物发生源。可分为天然大气污染源和人为大气污染源。大气污染物的天然发生源，如排出火山灰、二氧化硫、硫化氢等的活火山，自然溢出煤气和天然气的油田，放出有害气体的腐烂的动植物。天然污染源造成的大气污染，目前还不能控制。大气污染的人为发生源，如资源和能源的开发（包括核工业）、燃料的燃烧以及向大气释放污染物的各种生产场所、设施和装置等。

大气污染指示生物 indicator organism for atmospheric pollution 对大气污染反应灵敏，用来监测和评价大气污染状况的生物，包括大气污染指示植物和大气污染指示动物。

19世纪中期，就有人注意到城市中地衣植物逐渐消失，在烧煤的烟囱附近，植物叶片出现“病斑”，后发现这与空气污染有关，并认为可利用植物来监测和评价空气污染状况。例如用唐菖蒲等植物监测大气的氟化物污染；分析加拿大白杨、悬铃木等植物叶片的氟和硫的含量来监测较大范围大气中的氟化物和二氧化硫的污染；测定刺槐、皂角等植物叶片中铅、镉等的含量以监测大气中的重金属污染等。同时，选择出适合于一些地区应用的指示植物，如金荞麦等。动物对大气污染的敏感性一般比植物低，而且动物活动性大，在环境质量恶化时会迁移回避，因此，通常不大用来指示或监测大气污染。但有些小动物对一氧化碳（CO）的反应比人和植物灵敏得多。例如金丝雀、鼹鼠、麻雀、鸽子和狗等可用来作为CO的指示动物。猫的嗅觉特别灵敏，经过训练可以用来监测煤气管道漏气和CO污染源。近年来，一些动物生态学家提出以小动物分布的多样性指

数来指示大气污染。他们用灯光诱捕昆虫，统计一定时期内捕集到的昆虫种类和个体数目，求出多样性指数，用以表示大气污染程度。

大气压电离 atmospheric pressure ionization; API 在大气压状态下进行离子化的总称。例如：APCI（大气压化学电离），ESI（电喷雾），IS（离子喷雾），APS（大气压喷雾），APPI（大气压光致电离）等都属于大气压电离。

大气压光致电离 atmospheric pressure photoionization; APPI 在大气压环境中，用一定能量的光源（如 Kr 放电灯，$h\nu = 10eV$）照射样品，使之电离。



$$M + h\nu \longrightarrow M^{+\cdot} + e^-$$

大气压化学电离 atmospheric pressure chemical ionization; APCI 质谱分析中一种在大气压状态下进行的化学电离方式。在气体辅助下，溶剂和样品流过进样毛细管，在毛细管内样品和溶剂被加热气化，在毛细管出口通过喷雾形成样品气溶胶，在毛细管的出口附近有一个尖端电极，利用电晕放电使气体和溶剂电离，生成反应离子，反应离子再与样品进行反应实现样品离子化。

大气压化学电离接口 atmospheric pressure chemical ionization interface 质谱仪的一种重要接口，也是电离源。原理上和化学电离原理相同，但比传统的低压（约 1.33×10^{-3} Pa）下进行化学电离效率要高。接口由多层进样管、加热装置、高压放电电极组成。液相色谱流出物由最内层管进入，与外管的大流量气体（零级空气或氮气）混合，并在气体推动下从喷嘴喷出，进入加热的石英管，在石英管内形成蒸气混合体，从石英管喷出，在喷嘴下游，高压放电电极放电，使空气（或氮气）和溶剂电离，经分子-离子反应，得到被分析物离子。大气压化学电离源（APCI）常常作为电喷雾电离源的补充手段使用，APCI 主要产生单电荷离子，适合分析较小分子（分子量 1000u 以下）、弱极性和中等极性化合物。

大气样品采集技术 atmospheric sampling technology 根据污染分析和监测的特定要求，收集大气样品并进行浓缩的有关方法和操作，包括采样布点、采样方式和采样仪器的选用。大气样品的采集应根据被测物质在空气中存在的状态和浓度及所用的分析方法的灵敏度而定。常用于空气样品采集的方法有直接法、浓缩法和无动力采样法。

大气样品无动力采集法 atmospheric sampling method without power 不需要动力设备的大气采样方法，只依靠污染物分子扩散或渗透作用的大气采样方法。该方法简单易行。由于采样时间长，测得的结果能较好地反映空气被污染的情况。本法测定的结果代表一段较长时间的时间加权平均浓度。具体又可分成：（1）降尘的采集，分干法和湿法两种；（2）含硫污染物的采集，空气中含硫污染物可用二氧化铅法或碱片法采集；（3）

空气中氟化物的采集，用石灰悬浊液浸渍过的滤纸与空气中的氟化物反应，使之生成氟化钙或氟硅酸钙而被固定在滤纸上，以酸溶解后用氟电极法测得。

大气中的酸雾分析 acid mist analysis at atmosphere 大气中的酸性污染物如硫氧化合物、氮氧化合物等常溶解或以微尘吸附的形式存在于雾滴上形成酸雾所进行的分析。例如，某些大气中可溶性气态酸污染物（如二氧化硫、盐酸等）可被双氧水吸收，其中二氧化硫被氧化为硫酸，然后用四硼酸钠标准溶液滴定。二氧化碳不干扰测定。为避免微尘干扰，采样管前端安装颗粒物过滤器。检出限为0.2μg·ml⁻¹，当采样体积为2m³时，检出限为0.005mg·m⁻³。

大气中颗粒物和烟尘分级测定 particular and fume fractional determination at atmosphere 进行大气中颗粒物和烟尘分级测定的技术和操作。首先是采样，然后用重量法测定。通常采用串级撞击式采样器，采样器有大流量和小流量两种规格。大流量串级撞击式采样器法，采样量比较大，可连续进行24h采样。适用于在屋顶或广场等宽阔环境中测定空气颗粒物的粒度分布，但不能用于测定室内环境空气中颗粒物的粒度分布。本法所用的采样器又称安德森采样器。小流量采样器进行颗粒物分级的方法，适用于测定室内或居民区内狭窄小巷环境空气中颗粒物的粒度分布。

代浆全血 plasma substitute blood 含有200ml全血量的红细胞及等量代血浆，因大部分血浆已移去，引起不良反应的机会比全血少，兼有运氧和补充血容量作用。

代谢型生物传感器 biological metabolizing sensor 底物分子与固定化的敏感成分作用并生成产物，信号转换器将底物的消耗或产物的增加转变为输出信号的传感器，称为代谢型或催化型生物传感器。

代谢抑制试验 metabolic inhibition test 对杀细胞因子（如病毒和毒素）进行定量测定的一种方法。给一系列组织培养物分别接种不同稀释度的杀细胞因子，检查培养物的代谢活动。当不存在杀细胞因子时，组织培养物的生长，通常使培养基变酸。这种pH值变化是由于葡萄糖等细胞代谢形成酸性物质造成的。当存在杀细胞因子时，培养基的pH值变化被延缓或完全抑制，杀细胞因子效价可以通过测定培养物中引起的这种代谢抑制的该因素的最高稀释度来估算。

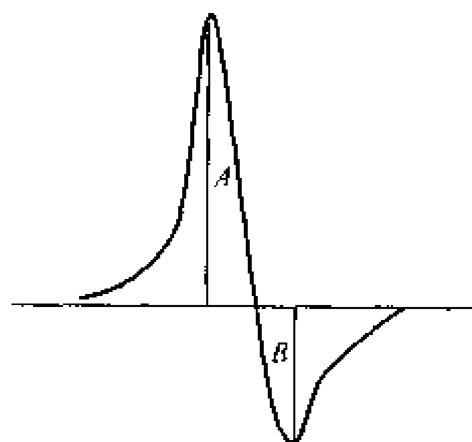
代用标准物质 surrogate reference material 其基体成分不同、被测元素和组分含量相同或相近的标准物质。由于标准物质的品种和数量有限，不能满足种类繁多的日常测定需要时，可使用代用标准物质。参见标准物质条。

带电粒子活化分析 charged particle activation analysis; CPAA 以带电粒子为辐照源将样品中稳定核转换为放射性核素，随后通过鉴定生成核素的特征射线并测量其强度，以对试样

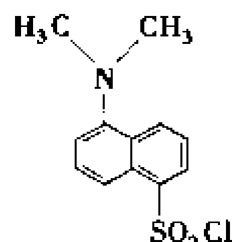
中被测元素进行定性和定量的活化分析方法。主要利用的核反应有(p,n)、(d,n)、(d,p)、(α,n)、(^{3}H, p)、(^{3}H, n)等。优点是能测定轻元素，而中子活化分析不能测定轻元素。带电粒子的射程有限，引起的核反应基本上发生在试样表面，适合于进行表面分析。缺点是活化反应比较复杂，且同时诱发其他核反应；核反应截面小，且随穿透距离而改变；试样吸收带电粒子的能量几乎全部转化为热量，需采用水冷措施；需要使用价格昂贵的实验设备，不易推广。参见活化分析条。

带通减速场分析器 band-pass retarding field analyzer; BRFA 是电子能谱的能量分析器的一种，是建立在拒斥场减速原理上的能量分析器。其优点是允许电子的入射角度范围大，非点源对分辨率的影响比较小，对屏蔽杂散磁场和材料剩磁的要求较低等。

戴森线型 Dysonian line shape 对于导电性样品，由于趋肤效应，电子自旋共振(ESR)谱显示出特有的不对称的 ESR 峰形，被称之为戴森(Dyson)线型。由图中 ESR 谱算出的*A/B*值，可得到传导电子通过趋肤深度所需的时间及电导率等信息。



丹磺酰氯 dansyl chloride 学名5-二甲氨基萘磺酰氯，分子式$C_{12}H_{12}ClNO_2S$，结构式如图。一种常用于标记氨基酸的荧光试剂。在0.1mol·L^{-1} $NaHCO_3$ 与丙酮的混合水溶液（体积比1∶1）等介质中与未被质子化的氨基迅速反应得到丹磺酰胺衍生物。除了与氨基、亚氨基反应外，还可以与胱氨酸等的SH基，酪氨酸等的OH，组氨酸的脒唑基反应。遇水容易发生分解生成发蓝色荧光的丹磺酸。由于丹磺酰氯的氨基酸衍生物具有强荧光，B. S. Hartley 等已于1958年将此试剂用于蛋白质N末端残基的结构解析。



丹尼尔电池 Daniel cell 把金属锌插入 $ZnSO_4$ 水溶液中，金属铜插入 $CuSO_4$ 水溶液中，两者用盐桥联结，可表示为：(－)Zn|$ZnSO_4$(a_1)‖$CuSO_4$(a_2)|Cu(＋)，以“|”表示金属和溶液的两相界面，以“‖”表示盐桥。由于Zn比Cu的标准电位要负，因此Zn较Cu活泼，Zn原子易失去电子，氧化成Zn^{2+}进入溶液相。Zn原子将失去的电子留在锌电极上，通过外电路流到铜电极上。Cu^{2+}接受

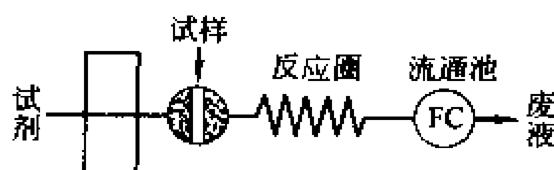
流来的电子成为金属铜沉积在铜电极上。因此 Zn 电极上发生的是氧化反应，是阳极，Cu 电极上发生的是还原反应，是阴极。电池的总反应方程式为：$Zn + Cu^{2+} \rightleftharpoons Zn^{2+} + Cu$，外电路电子流动的方向是，电子由 Zn 电极流向 Cu 电极。电流的方向与此相反，由 Cu 电极流向 Zn 电极。所以 Cu 电极的电位较高为正，Zn 电极的电位较低为负。该电池反应能自发地进行，是一个原电池。

担体 support 现又多称为载体。在气-液色谱或液-液色谱的固定相中，指涂渍（或承载）固定液的具有多孔结构的化学惰性支持物。常用的载体有硅藻土型，SiO_2 型及高分子聚合物型等。在实际使用中，由于载体在色谱过程中并不完全是惰性的，因此需要进行钝化处理。参见**载体的钝化**条。在气-液（或液-液）色谱中，固定液对色谱分离起着重要的作用，为了使样品（包括流动相）与固定液间具有尽可能大的接触界面，通常是将固定液均匀地附着在载体表面，形成一层液膜。参见**载体**条。

单纯形优化法 simplex optimization method 简称单纯形法。利用多维空间中的一种凸图形（即单纯形）有规则的移动以实现实验参数优化的一种动态调优方法。每一次选用的试验条件由前一次实验的结果来确定。现在广泛应用的是 1965 年内尔德（J. A. Nelder）等提出的改进单纯形优化法，它是在 1962 年斯彭德莱（W. Spendley）等首先提出的基本单纯形优化法的基础上，加速了优化过程，变固定步长为可变步长，并引入了反射、扩大与收缩规则。单纯形法的优点是计算简便，不受因素数目的限制，只需进行少数实验就可找到最佳的试验条件。

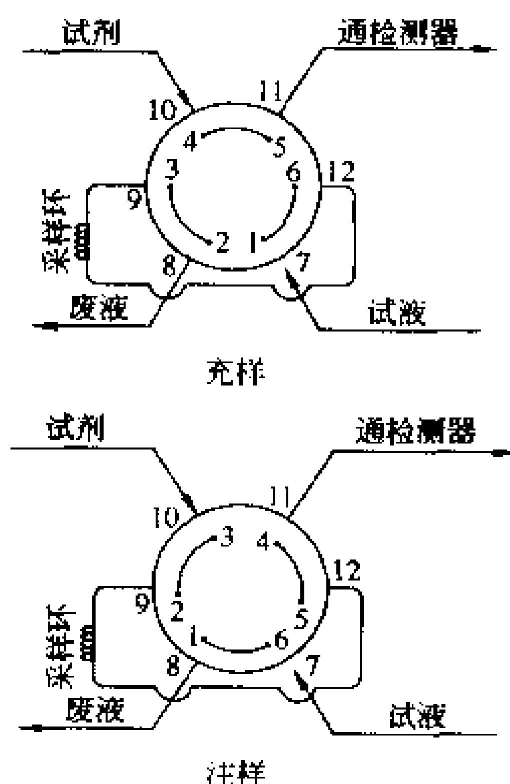
单重态 singlet state 根据鲍林不相容原理，处于同一分子轨道的两个电子的自旋方向应相反。当分子中占据同一分子轨道的电子完全处于自旋配对（自旋方向相反）时，称其为处于单重态。基态的分子通常处于单重态。若电子具有相同的自旋，即它们未配对，则称该分子处于三重态（triplet state）。单重态和三重态称为分子多重性（multiplicity）。

单道流路 single-line manifold 是指用试剂溶液作载流的最简单的 FIA 系统（见图）。将初始浓度的样品（c_S^0）注入到含试剂 c_R^0 的载流中，产生浓度 c_S 和 c_R，二者在检测器中观察到的是样品带和载流互相分散的结果。样品和试剂的浓度梯度互为镜像，若分散系数达到 1，则样品带的中心试剂必然不足。故欲在整个样品带上保持试剂足够过量，至少需 5 倍于化学计量。



单道注入阀 single-channel injection valve 通常指六孔三槽旋转阀、双层结构，转子上有三个沟槽等距离分布在一个同心圆上，槽的长度是同

心圆周长的1/6。在定子上有6个可外连管道的孔，其位置与转子上槽的两端相通。将两个相对的孔连接成采样环，环的一侧是试样入口和废液出口；另一侧是载液入口和通向检测器的出口。转子的转角为60度，不是处在采样位置就是处于注入位置。可以手工操作，也可用电机程控转动。使用该阀可将试样或试剂注入到流路的不同部位（见下图），以满足FIA的各种注入的需要。图中六孔进样阀转子上孔的号数为1～6，定子的孔号为7～12。阀芯材料常用具有良好化学稳定性的聚四氟乙烯和聚三氟氯乙烯配对使用，金属陶瓷材料则有更好的耐压、耐磨和密封性，使用寿命也更长。



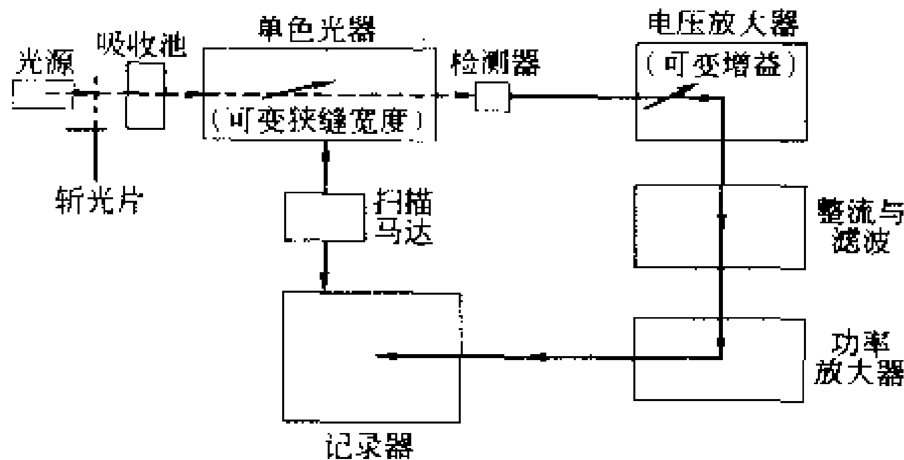
单分散气溶胶发生器 monodiaperse aerosol generator 一种液相色谱-质谱联用的接口。在接口处液相色谱馏分与高速氦气流相遇成为气溶胶，雾滴通过去溶剂室时，溶剂气化产生溶剂蒸气、氦与组分离子的混合物。此混合物由二级动量分离器的真空所加速，聚焦成束状以超音速自喷口进入分离器，在这里溶剂蒸气由真空泵抽走，组分浓集成粒子束，进入质谱离子源气化，用电子轰击离子化或其他方法离子化。

单分子分解 unimolecular decomposition 在质谱分析中，系统的压力低到足以忽略双分子、离子和分子或其他碰撞反应，电离后生成的离子没有太多过剩能量，引起离子分解的能量除原有的少量热能外，完全是从最初电离过程中获得的。由此引起离子的碎裂称为单分子分解反应。

单缝燃烧器 single-slot burner 一种具有单一缝型燃烧口的燃烧器。用大块不锈钢或钛钢制作，以防止燃烧缝在高温下变形。燃烧缝的宽度和长度取决于火焰的燃烧速度，燃烧速度快的火焰，需使用较窄的缝宽和较短的缝长。对于空气-乙炔火焰，在燃烧缝长为100mm时，保证不发生回火事故最大允许的缝宽约为0.63mm。为安全起见，常用缝宽为0.5mm、长度为100mm或50mm（用于氧化亚氮-乙炔火焰）。缝形燃烧器的优点是，产生层流火焰，燃烧稳定，有效吸收光程长，可以获得较高的灵敏度。

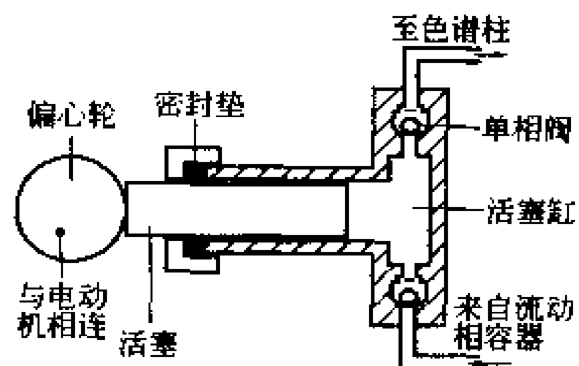
单光束红外分光计 single beam infrared spectrometer 红外光源的光

束经过以恒定速度旋转的斩光片后通过样品池而进入单色器，经分光后由检测器检测，如图。检测器输出的交变信号经整流、滤波和放大后，驱动记录笔记录相应的光强信号。扫描电机推动单色器并同时转动记录纸。由于单光束仪器只能记录吸收池、溶质、溶剂和光学部件透过的光强绝对值，不能直接记录透光率。仪器的任何部分变动都会引起光强的改变，故测量精度较差。现基本上已被淘汰。



单光束红外分光计

单活塞往复泵 single piston reciprocating pump 只有一个活塞的往复泵。其结构如右图所示，在活塞柱的一端有一偏心轮，偏心轮连在电动机上，电动机带动偏心轮转动时，活塞柱则随之左右移动。在活塞的另一端有上下两个单向阀，各有 1～2 个蓝宝石或陶瓷球，由其起阀门的作用。下单向阀与流动相连通，为活塞的溶液入口；上单向阀与色谱柱相连，为活塞的溶液出口。活塞柱向外移动时，出口单向阀关闭，入口单向阀打开，溶液（流动相）抽入活塞缸。活塞柱向里移动时，入口单向阀关闭，出口单向阀打开，流动相被压出活塞缸，流向色谱柱。单活塞往复泵构造简单、价格便宜。活塞柱的移动距离是可变的，流量由活塞柱的移动距离所决定。因为偏心轮一般每分钟转 50～60 次，也就是流动相的抽入和吐出以每分钟 50～60 次的频率周期性变化，所以，产生的脉冲很显著。减缓脉冲的办法就是在泵出口与色谱柱入口之间安装一个脉冲阻尼器。



单晶 X 射线衍射法 single crystal X-ray diffraction 利用单晶体对 X 射线的衍射效应测定晶体结构的方法。

对于一粒半径约为0.05～0.4mm的单晶样品，准确测定15～30条衍射线在空间的衍射方向，就可由此推算出晶体结构在三维空间的重复周期，即晶胞的大小和形状。在此基础上，收集大量（成千，甚至上万条）衍射线的强度值，根据强度数据的系统消光规律和统计规律，可以推断出晶体所属的衍射群，以至空间群。进而，依据实测的衍射强度数据通过直接法或重原子法等手段提出初始结构模型，并反复地进行删改和修正，使得由模型算出的结构因子与由实测强度得到的结构因子尽可能地接近，直至得到最终的晶体结构，即每个独立原子的三维坐标和热振动参数。单晶衍射法能获得有关晶体结构可靠而精确的数据，在化学、物理学、生物学、材料科学以及矿物学等领域中都有广泛而重要的应用，是人们认识物质微观结构的重要途径。

单聚焦质谱仪 single focusing mass spectrometer 仅对离子进行方向聚焦的质谱仪。它的质量分析器仅是一个扇形磁场，带电粒子加速进入磁场后，在洛伦兹力的作用下，运动方向发生偏转，运动轨迹改为圆周运动。其曲率半径的大小与质量/电荷比值有关。根据这个原理，不同质/荷比的离子经过磁场后即可分开。从一点出发、具有相同质荷比和相同初速度的离子，如果以不同的角度进入磁场，经磁场偏转后，此束离子可以聚焦在一点。

单克隆抗体 monoclonal antibody; McAb 由一株B淋巴细胞杂交瘤增殖而成的单一克隆细胞所产生的一种高度均一、高度专一性的抗体。1975年Milstein等人首次应用细胞融合技术使小鼠免疫脾（B）细胞与小鼠骨髓瘤细胞融合，形成杂交瘤细胞。这种杂交瘤细胞既保持了骨髓瘤细胞大量无限增生的特性，又继承了免疫B细胞合成分泌某种特异性抗体的能力。将这种融合成功的单克隆杂交细胞株体外培养扩增或接种于小鼠腹腔内，就可从培养上清液或腹水中获得单克隆抗体。每种单克隆抗体只识别某一特定的抗原决定簇，具有高度特异性，而且其类、亚类、型及亲和力也完全相同，即具有高度均一性。单克隆抗体已广泛应用于医学生物学各领域，例如用McAb代替PcAb能克服交叉反应，提高免疫学试验的特异性和敏感性；用McAb作亲和层析，可分离纯化含量极低的可溶性抗原如激素、细胞因子和难以纯化的肿瘤抗原等；制备识别细胞表面标志的McAb，可用于细胞发生、分化，细胞功能和免疫调节等作用的研究；制备肿瘤特异性McAb，与抗癌药物、毒素或放射性物质偶联构建生物导弹，用于肿瘤临床治疗。

单量子跃迁 single-quantum transition 见交叉弛豫条。

单色光 monochromatic light 指理论意义上仅具一定波长的光。实际上，无论仪器的色散元件（棱镜、光栅）等光学系统的质量有多高，单色化后的光仍具有一定的波长范

围。因此，所谓单色光实际上是以所要求波长为中心波长的、具有一定的波长范围的狭窄的谱带。

单色器 monochromator 从波长范围宽广的光线中分出波长单一的单色光的光学装置。单色器通常由入射狭缝、准直元件、色散元件、聚焦元件和出射狭缝组成。最常用的色散元件有棱镜和光栅。单色器是分光光度计的重要组成部件之一。

单色X射线吸收分析法 X-ray absorption spectrophotometry 与分光光度法相似的X射线吸收分析法。本法的理论基础仍然是朗伯-比尔定律，入射光采用单一波长的X射线束。有单波长与双波长之分：在单波长方法中，应尽可能地选择波长处于待测元素吸收限的短波侧，且具有较高强度的特征谱线作为样品的照射源，以提高方法的灵敏度；在双波长方法中，则将两种波长尽可能地选择在待测元素吸收陡变最大的吸收限两侧，以提高方法的灵敏度。

单体荧光 monomer fluorescence 与二聚体、多聚体荧光相对应，指构成多聚体的基本结构单元即单体的荧光发射。如芘的单体荧光光谱与其二聚体的荧光光谱相比明显不同，后者在470nm附近呈现无结构特征的一个宽峰，而前者在370～400nm之间有振动精细结构的典型发射峰，其第三峰（395nm附近）与第一峰（370nm附近）的荧光强度之比（I_3/I_1）对介质环境很敏感，可用作探测环境极性的重要参数。

单同位素质量 monoisotopic mass 由各元素的单同位素的精确质量计算得到的分子的质量，例如，单同位素的精确质量 $^{12}C = 12.0000$，$^{1}H = 1.0078$，$^{16}O = 15.9949$，$^{14}N = 14.0031$ 等。用单同位素的精确质量计算物质的分子量时，单同位素的选择原则为：天然丰度最大。根据不同的同位素计算出的化合物分子量相互间会出现不同的数值。因此，用单同位素计算时应注明所采用的同位素，例如，$^{12}C_{10}{}^{1}H_{22}{}^{14}N_2{}^{16}O_2 = 202.172$。

单位结构因子 unitary structure factor 晶体结构分析中，经过校正的结构因子，用 U_{hkl} 表示。

$$U_{hkl} = \frac{F_{hkl}}{\sum_j f_j}$$

式中，F_{hkl} 是衍射 hkl 的结构因子；f_j 是第 j 个原子的原子散射因子。在直接法中，有时用单位结构因子代替结构因子，以减小原子散射因子随入射X射线波长和衍射角而改变的影响。单位结构因子的绝对值在0～1之间，最大值为1，此时相当于晶胞中所有原子的相角都相同，即晶胞中所有的原子都处于与衍射 hkl 相应的衍射面上。

单线态 singlet 多重度为1的状态，用 S 表示。电子的自旋状态用自旋多重度 M 来表示，定义 $M = 2S+1$，其中 S 为电子自旋量子数的代数和。如果分子中全部轨道里的电子都是自旋配对的，即同一轨道里的两个电子自旋相反（自旋量子数分别为 +1/2 和 −1/2），则自旋量子数

的总和为零，$M=1$。该分子便处于单线态，大多数有机物分子的基态都处于单线态。

单相色谱仪 single phase chromatograph 又称场流分离仪。因其不存在通常色谱体系的固定相，而只有流动相而得名。参见**场流分离仪**条。

单向阀 one-way valve 只允许流体单向流动的阀门，多用于液相色谱输液泵系统。其构造参见**单活塞往复泵**条，在活塞的右端有上下两个单向阀，各有1~2个蓝宝石或陶瓷球，由其起阀门作用。下面的单向阀与流动相连通，为活塞的溶液入口；上面的单向阀与色谱柱相连，为活塞的溶液出口。柱塞向外移动时，出口单向阀关闭，入口单向阀打开，溶液（流动相）抽入活塞缸。当柱塞向里移动时，入口单向阀关闭，出口单向阀打开，流动相被压出活塞缸，流向色谱柱。

单向免疫扩散试验 single immunodiffusion 将适当浓度的已知抗体预先混在1%~5%琼脂内制成凝胶板，然后以适当距离在上面打孔，孔中加入待检抗原，抗原向周围扩散时，与琼脂中的抗体相遇，两者可在最合适的比例处形成白色沉淀环。鉴于沉淀环直径与抗原浓度呈正比，所以先用已知不同浓度的标准抗原制成标准曲线，便可根据测试样品沉淀环直径的大小，从标准曲线中查出样品中抗原的含量。本法常用于血清中各类免疫球蛋白含量和补体成分含量的检测。

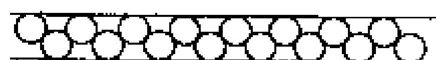
单斜晶系 monoclinic system 一种低级晶系，晶体所属点群的特征对称性是：只在一个方向上具有二次对称性（对称面或二重对称轴）。单斜晶系的晶胞参数之间的关系为：$a \neq b \neq c$，$\alpha=\gamma=90°$，$\beta>90°$，选取晶胞时应使b轴平行于二重轴或垂直于对称面，选垂直于b轴的晶棱作为a轴和c轴。单斜晶胞的另一种取法目前已经很少使用，即以c轴作为独立轴，取：$a \neq b \neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma>90°$。单斜晶系有两种可能的布拉维格子-单斜简单格子和单斜底心格子。

单因素（子）试验 one-factor experiment 又称单因素轮换试验。固定共存的其他因素的水平，每次改变其中某一个因素的水平进行实验，循此轮换对各个因素进行试验，由各轮换试验得到的优化条件，组合为最终的最佳条件。这是以往分析人员惯常使用的试验方法，优点是试验设计简单，操作方便，数据处理工作量少。当共存因素之间不存在交互作用时，它是有效的。但当共存因素之间存在协同或抑制作用时，某个因素单独存在时的效应，与有协同或抑制作用的其他因素共同存在时它所产生的效应是不同的。因此，在因素之间存在协同或抑制作用时，单因素轮换试验是不可取的，不能真实地反映客观事物和现象的本质。

单值移动极差控制图 x-R_s control chart 用在较长时期内积累的预备数据建立起来的以监控产品质量的控制图。控制图的纵坐标是产品特性量值

的单次测定值和移动极差（相邻两次测定值的差值），横坐标是抽样时间或样本序号，单值控制图在上面，移动极差控制图在下面。单值控制图的中心控制线是每次抽样的单次测定值的平均值$\bar{x}$，上、下控制限分别为$UCL=\bar{x}+2.66\bar{R}_s$与$LCL=\bar{x}-2.66\bar{R}_s$。移动极差控制图的中心控制线是移动极差的平均值$\bar{R}_s$，上控制限是$UCL=3.27\bar{R}_s$，下控制限不考虑。

单珠串联反应器 single-bead string reactor 是FIA流路中的部件之一。最简单的珠串反应器是在一段内径较粗（例如0.75mm）的直管中装入直径较小（例如0.6mm）的玻璃珠而成。如图。这样，在1m长的管道中就有1738粒小球。它是增强径向分散的有效装置，借此可以得到对称的峰，并能有效的限制样品带展宽。缺点是增加流动阻力和样品携出，且易滞留小气泡。



单柱离子色谱法 single column ion chromatography 又称非抑制型离子色谱法。是只使用分离柱，而不在分离柱后连接抑制柱的离子色谱法。参见**非抑制型离子色谱法**条。

胆固醇传感器 cholesterol sensor 可用于高选择性和灵敏性测定胆固醇的便携式分析仪器，其工作原理是基于胆固醇氧化酶与胆固醇分子的特异性反应而实现对底物分子的监测。

胆红素 bilirubin 是由衰老红细胞破坏、降解而来，部分来自非血红蛋白的血红素蛋白质以及无效造血所产生的胆红素。血红素经血红素加氧酶作用生成胆绿素，后者经胆绿素还原酶作用而生成胆红素，在肝内胆红素与葡萄糖醛酸结合生成结合胆红素。

胆色素 bile pigment 胆色素是血红素蛋白的辅基，包括胆绿素、胆红素、胆素原和胆素。其中胆绿素是胆红素的前体，而胆素原和胆素是胆红素的产物。

胆汁酸 bile acid 是胆汁中存在的一大类胆烷酸的总称。人类胆汁中存在的胆汁酸主要有胆酸（CA）、鹅脱氧胆酸（CDCA）、脱氧胆酸（DCA）、并有少量石胆酸（LCA）及微量熊脱氧胆酸（UDCA）。在肝细胞内以胆固醇为原料合成的叫初级胆汁酸（包括胆酸及鹅脱氧胆酸）；在肠内以初级胆汁酸为原料由肠菌酶作用而形成的称次级胆汁酸（包括脱氧胆酸、石胆酸及熊脱氧胆酸）。

蛋白成膜伏安法 protein-film voltammetry 一种蛋白质电化学研究方法。将蛋白质溶解在一定的介质中后，将一定的电化学电极浸入该蛋白质溶液中，一定时间后，该蛋白质溶液在电极表面形成稳定单层或多层膜。如该蛋白质是氧化还原型，可以利用伏安法研究其电子传递行为。同样也可以研究酶促反应中的电子传递行为。

蛋白酶K proteinase K 一种很强

的蛋白溶解酶，其特点是在 SDS 溶液中仍具有活性，所以，被用于从核酸混合液中去除蛋白质和酶。

蛋白质 protein 是构成有生命的生物和活细胞的结构和功能的重要物质。由氨基酸之间通过 α-羧基共频连接成为肽链。含有 3 个或 3 个以上氨基酸的蛋白质分子称为多肽。仅由氨基酸组成的蛋白质称为单纯蛋白质，由氨基酸序列与非蛋白辅基结合组成的蛋白质称为结合蛋白质。蛋白质的结构与大小千差万别。其三维结构构象对蛋白质生物活性和功能的影响很大。蛋白质的结构分为 4 级。

蛋白质测定 determination of protein 测定蛋白质含量的方法很多，最常用的方法是凯氏定氮法，此外还有双缩脲法、染料结合法、酚试剂法等；仪器分析方法包括自动定氮仪、紫外-可见分光光度法、荧光光谱法、近红外光谱法、凝胶色谱法、飞行时间质谱法、中子活化法等。

蛋白质电位滴定测定法 determination of protein by potentiometer 根据氨基酸的两性作用，加入甲醛，$—NH_2$基先与甲醛结合，以固定氨基的碱性，使氨基酸的羧基显示出酸性。将酸度计的玻璃电极及甘汞电极同时插入被测液中构成电池，用氢氧化钠标准溶液滴定，依据酸度计指示的 pH 值判断和控制滴定终点，可测得氨基酸中的氨基酸态氮的百分含量。

氮-磷检测器 nitrogen-phosphorus detector; NPD 是热离子化检测器(thermionicionization detector，TID)中使用最多的一种，其前身是碱火焰电离检测器(AFID)，但其稳定性和寿命都比 AFID 优越。NPD 的结构与 FID 相似，NPD 的特点是在 FID 喷嘴和收集极之间放置了一个含硅酸铷的玻璃珠，工作时铷珠通过镍丝电流加热，使周围的氢分子分解成活性氢原子，氢原子进一步与氧分子反应形成高化学活性的边界层，当样品进入后，含氮、磷的组分在热化学活性边界层分解，生成电负性碎片 NO_2、CN、PO_2、PO 等，离子化后由收集极收集检测，选择性：N/C 为 5×10^4，P/C 为 1×10^5。检测限为 $5\times10^{-14}g\cdot s^{-1}$(P)(马拉硫磷)，$\leqslant1\times10^{-3}g\cdot s^{-1}$ (N) (偶氮苯)。

氘代试剂 deuterated reagent 其中的^1H被^2D取代的化学试剂。为获取液体高分辨 NMR 谱，常用氘代溶剂溶解或稀释样品。不仅抑制溶剂的干扰还可作为化学位移的参考标准。氘可作为内锁信号。常用的氘代溶剂有 $CDCl_3$，$(CD_3)_2CO$，$(CD_3)_2SO$，C_6D_6，C_5D_5N，CD_3OD 等。

氘灯 deuterium lamp 是一种氘气弧光放电灯，能辐射出 180～370nm 波段范围的连续光谱，在 220～230nm 处出现紫外辐射峰区，若采用 Mg_2F 等紫外窗则可在 170nm 以下的真空紫外区也有较强的辐射。与氢灯相比，氘灯的紫外辐射强度更大，还有稳定性好、寿命较长等优点。除了直接用作紫外辐射源以外，在原子吸收分光光度计中，氘灯是最常用的背景校正光源。

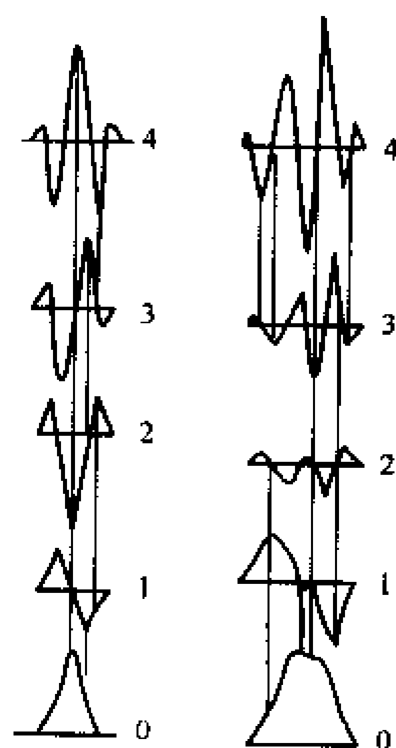
氘灯校正背景 deuterium lamp background correction 利用氘灯发出的连续辐射扣除背景吸收。在原子吸收光谱分析中，当用空心阴极灯锐线光源测定光吸收时，测得的是原子吸收和背景吸收的总吸光度 A_t，而用氘灯连续光源测量光吸收时，由于被测元素的原子吸收很小（约相当于总入射光强的1%），可以忽略不计，可以将测得的吸光度 A_b 仅看作是背景吸收。用空心阴极灯和氘灯两次测得吸光度相减，$A = A_t - A_b$，即得到扣除了背景吸收的谱线净吸光度值。氘灯发射较强的波长区是190～350nm，因此，氘灯用来校正紫外光谱区的背景吸收。校正可见区的背景吸收需用碘钨灯或氙灯。

导磁率 magnetic conductivity permeability 表示介质磁性的物理量，量纲为1。当介质在磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 的情况下，具有磁化矢量强度 $\boldsymbol{M}$ 的介质产生附加磁场 $\boldsymbol{H}'$ 为：$\boldsymbol{H}' = 4\pi\boldsymbol{M} = 4\pi\chi\boldsymbol{H}$。$\chi$ 为磁化率。体系的磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 可表示为 $\boldsymbol{B} = (1 + 4\pi\chi)\boldsymbol{H} = \mu\boldsymbol{H}$。这里 $\mu = 1 + 4\pi\chi$，μ 称为导磁率，也称为导磁系数。在相同磁场中，介质的导磁率越大，磁感应强度也越大。

导电胶 conductive paste 在进行扫描电镜分析时，如需分析的样品是粉末样品或不导电样品，可将其粘在一层表面涂有石墨胶或火棉胶的粘带上，以方便检测。主要起导电作用，降低分析过程中样品的充电现象。其要求是应该具有较低的真空放气性能和较好的导电能力。

导数比率法 derivative ratio method 基于双波长分光光度法和系数倍率法的原理，采用导数光谱处理的一种新型测定方法，可以很方便地对两个或两个以上相互重叠或很靠近的吸收峰，进行分辨和测定。通常利用测定波长以及干扰波长处微分倍率差，进行计算。

导数分光光度法 derivative spectrophotometry 利用导数吸收光谱进行测定的一种光度分析技术。导数光谱对吸收强度随波长的变化很敏感，对重叠吸收带有较好的分辨能力，能选择性地放大窄而弱的吸收带，从而能从一个强干扰背景中检测出较弱的信号，提高狭窄谱带吸收强度从而提高分析灵敏度。所以，导数分光光度法在多组分同时测定、浑浊样品分析、消除背景干扰、强化光谱精细结



构和复杂光谱的解析等方面有其独特的优点。目前，市售的分光光度计已能方便地获得 1～4 阶甚至更高阶的导数光谱。参见**导数光谱**条。

导数光谱 derivative spectra 物质分子对不同波长的光具有选择性吸收的性质，通常用吸收光谱（A-λ 曲线）来描述。如果将吸光度 A 对波长 λ 求一阶导数，将此一次微分信号对波长作图，所得曲线称为一阶导数光谱（$dA/d\lambda$-λ 曲线）。同理可获得二阶、三阶、四阶、高价导数光谱。吸收光谱与各阶导数光谱间峰、谷的对应关系参见图。利用导数吸收光谱进行物质定量测定的分析技术称为导数分光光度法。参见**导数分光光度法**条。

导数同步荧光 derivative synchronous fluorescence 将同步扫描和导数荧光光谱两种技术结合起来的方法。导数荧光光谱有利于增强次要光谱，导数阶数越高，谱带变得越尖锐，分辨率提高，但信噪比降低。而导数同步荧光既可以改善分辨能力，排除基体干扰，又有利于提高灵敏度。它是一种适用于混合物分析的快速、简便和有效的方法。参见**导数荧光**条。

导数荧光 derivative fluorescence 记录荧光强度对波长的一阶导数或更高阶的导数，可以得到相应的导数荧光光谱。如以荧光强度随波长改变的速率（即一阶导数 $dI/d\lambda$）为纵坐标，波长为横坐标，记录的荧光光谱即为一阶导数荧光光谱。以此类推，纵坐标为 $d^2I/d\lambda^2$ 时是二阶导数荧光光谱。导数荧光的定量基础是固定测定波长等条件下，荧光强度对波长的导数值与分析物的浓度成正比关系。导数荧光的优点是可以减小光谱干扰，增强特征光谱精细结构的分辨能力。在分辨多组分混合物的谱带重叠、增强次要光谱的清晰度和测定弱的尖峰时十分有利。

倒数线色散率 reciprocal linear dispersion 表示摄谱仪线色散率的大小的一个参数，以线色散率的倒数 $d\lambda/dl = 1/L_\lambda$ 表示。其单位为 $nm \cdot mm^{-1}$。仪器说明书中常给出倒数线色散率的数值。线色散率表示相差单位波长 $d\lambda$ 的两条谱线在摄谱仪单位长度的焦面 F 上所能容纳的波长数。其值越小，表示二谱线在焦面上分开的距离越大。参见**线色散率**条。

倒易点阵 reciprocal lattice 为便于处理晶体结构同其 X 射线衍射效应的关系而引进的抽象点阵。设晶体点阵的一组基矢为 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$，如果用下式定义另一组基矢 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$，使

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \qquad (i,j=1,2,3)$$

则由新的一组基矢 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$ 所代表的点阵与原晶体点阵有互为倒易的关系，被称为是原晶体点阵的倒易点阵。两个互为倒易的点阵之间存在着如下关系：（1）由基矢决定的晶胞体积互为倒数；（2）原晶体点阵中指数为 h，k，l 的一族点阵平面垂直于其倒易点阵中由原点指向倒易点阵点（h，k，l）的矢量 $\boldsymbol{H} = h\boldsymbol{b}_1 +$

$kb_2 + lb_3$，而且矢量 H 的长度同阵面族的面间距成反比。在X射线晶体学中，用一个倒易点阵点来代表晶体点阵中的一个阵面族，以倒易点阵点的坐标（h，k，l）作为阵面族所产生衍射的衍射指标 hkl，从而使倒易点阵点和衍射图上的衍射斑点联系起来。各种衍射现象的几何学，衍射公式的推导，现代衍射仪器的设计和应用，衍射数据的处理，以及用衍射数据测定晶体结构的许多环节，都离不开倒易点阵。

倒易晶胞 reciprocal cell 为便于处理晶体结构同其X射线衍射效应的关系而引进的抽象晶胞，是由倒易点阵中的3个基矢定义的平行六面体。倒易晶胞参数与晶胞参数相互换算的关系式如下

$$a^* = \frac{bc\sin\alpha}{V} \quad \cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma}$$

$$b^* = \frac{ac\sin\beta}{V} \quad \cos\beta^* = \frac{\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta}{\sin\alpha\sin\gamma}$$

$$c^* = \frac{ab\sin\gamma}{V} \quad \cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}$$

$$V^* = \frac{1}{V} = a^* b^* c^* \times \sqrt{1 - \cos^2\alpha^* - \cos^2\beta^* - \cos^2\gamma^* + 2\cos\alpha^*\cos\beta^*\cos\gamma^*}$$

式中，a、b、c、α、β、γ 和 a^*、b^*、c^*、α^*、β^*、γ^* 分别为晶胞参数和倒易晶胞参数；V 和 V^* 则为晶胞体积和倒易晶胞体积。当晶胞的基矢长度用 pm（或 Ù）为单位时，倒易晶胞基矢的长度相应地以 pm^{-1}（或 $Ù^{-1}$）为单位。由于点阵与倒易点阵具有互为变换的性质，所以将上式中带 * 号的变量看做晶胞参数，不带 * 号的变量看做倒易晶胞参数，等式同样成立。

德拜-比谢非均匀固体光散射理论 Debye-Bueche inhomogeneous solid light scattering theory 由德拜和比谢于1949年创立，他们成功地将光散射源与非均匀性的基本原理用于表征固体材料的非均匀性，创立了非均匀固体光散射理论。其基本公式为

$$I(\boldsymbol{K}) = 4\pi K^1 V_S \overline{\eta^2} \int_0^\infty \gamma(r) \frac{\sin(\boldsymbol{K}r)^2}{\boldsymbol{K}r} r^2 dr$$

式中，$I(\boldsymbol{K})$ 表示散射强度；K^1 为常数；$\overline{\eta^2}$ 为极化率的均方涨落；$\boldsymbol{K}$ 是散射矢量；$\boldsymbol{r}$ 为空间任意一点到原点的矢径；V_S 是散射体积。如果是均匀体系，则没有散射；若为非均匀体系，则散射强度正比于 $\overline{\eta^2}$ 和 ω_0 的乘积。ω_0 为相关体积，

$$\omega_0 = \int_0^\infty \gamma(r) \times 4\pi r^2 dr。$$

等电点 isoelectric point；IEP 对两性分子而言，当分子上的净电荷等于零时的 pH 值称为该分子的等电点。例如，氨基酸是两性分子（既可作为酸亦可作为碱），在溶液中以两性离子型体（同时含羧基—COO^- 和质子化的氨基—NH_3^+，分子的净电荷等于零）存在。当溶液的 pH 值小于其等电点 pH 值时，其羧基—COO^- 会被质子化形成氨基酸阳离子；而若当溶液的 pH 值大于其等电点 pH 值时，其质子化的氨基—NH_3^+ 会失去质子形成氨基酸阴离子。不同氨基酸的等电点不同。

等电点聚焦 isoelectric focusing; IEF 根据每种蛋白质各自都有一个等电点的特性，如果将它们放在一个连续的 pH 梯度环境的电场中，不同蛋白质就会迁移并停留在各自的等电点位置上，也就是被聚焦于一个狭的区带中，称为等电点聚焦。此方法可用来分离蛋白质。

等度洗脱 isocratic elution 在一次色谱分离操作过程中，不改变流动相的组成和浓度，即以等强度流动相洗脱全部组分的方法。

等方差性 equal variance 又称方差齐性、同方差性和方差一致性。指被检验的各方差在给定显著性水平在统计上没有显著性差异。

等方差性检验 test for equal variance 从统计上检验各方差在给定的显著性水平下是否齐性（一致性）。检验方差齐性的方法有χ^2检验法，F检验法，巴特莱检验法、科克伦检验法，哈特利检验法等。

等精度测量 equally accurate measurement 各次测量具有相同的精度。同一个人在相同的试验条件下，在短时间内对同一试样进行多次重复测量，可视为等精度测量。不同的实验室在相同的条件下对相同的试样进行的多次重复测量，或同一个人在相同的试验条件下，在较长的时间内对同一试样进行的多次重复测量，有可能是等精度测量，亦可能是非等精度测量，是否为等精度测量，需对测量的方差进行等方差性检验。

等距抽样 systematic sampling 又称系统抽样或机械抽样。参见**系统抽样**条。

等离子体 plasma 也称“等离子区”。一般指电离的气体，主要由离子、电子和未经电离的中性粒子所组成。因正负电荷密度几乎相等，故从整体上看呈现电中性。例如，火焰和电弧中的高温部分，太阳和气体恒星的表面等。在等离子体中电磁力起主要作用，能引起和普通气体大不相同的内部运动形态，例如电子和离子的集体震荡，因此也有人称它为“物质第四态”。等离子体的研究在天体物理学、气体放电、微波和超声波流体学方面都有重要作用。在表面分析中，主要用来产生高密度离子束。

等离子体光源 plasma photosource 等离子体是一种电离度大于 0.1% 的电离气体，由电子、离子、原子和分子等组成，其中电子数目和离子数目基本相等，整体呈现中性，也称为物质的第四态。常用光源的发光蒸气云也是等离子体。但是，这里所说的等离子体光源，仅指新近发展起来的直流等离子焰、高频等离子炬（频率小于 100MHz）和微波等离子炬（频率为 200～9000MHz）三类。前一类分有电流型和无电流型，后一类分电感耦合型和电容耦合型。最常用的等离子体光源是直流等离子焰（DCP）、电感耦合高频等离子炬（ICP）和容耦微波等离子炬（CMP）。直流等离子焰的设备比较简单，检出限和精密度都较好，基体效应不大，测定范围较宽，现已得到应用。电感耦合高频等

离子炬检出限好，精密度高，基体效应小，测定范围宽，现已得到广泛应用。容耦微波等离子炬的检出限和精密度都较差，化学干扰、电离干扰和基体影响都较严重，现在应用尚少。

等离子体解吸 plasma desorption; PD 质谱分析中的一种离子化方法。将被分析的样品涂敷在金属薄膜或纤维素膜上，由放射性元素^{252}Cf产生裂变，生成高能量（约100MeV）的快速的、方向相反的两个离子，$^{106}Tc^{22+}$和$^{142}Ba^{18+}$离子，一个离子飞向质谱的“开始检测”开关，另一个离子打在涂敷样品的金属薄膜或纤维素膜上，从而使样品温度瞬间升至数百度，当升温速度高于样品的分解速度时，样品来不及分解就从表面挥发并同时电离。该方法属于一种重离子诱导解吸法。

等离子体炬管 plasma torch tube 等离子体光源的主要部件，由三层同心石英管构成。它是由 Reed 炬管改进后用于光谱分析，在高频电磁场作用下，使流经石英管的载气（通常是氩气）电离而形成能自持的稳定等离子体。当增加频率时，由于趋肤效应，等离子体形成环状结构，从而获得良好的光谱分析性能。通常将石英炬管称为等离子体炬管。

等离子体色谱法 plasma chromatography 经气相色谱分离后的各组分与等离子体接触而反应，可得到非常稳定的离子-分子，这些离子-分子连续地进入一个充满非反应气的管内，经电场作用而发生漂移，由于被分离组分的结构不同，相应的离子-分子漂移的速率不同，到达收集器的时间也就不同，从而获得了彼此的分离。根据记录的等离子谱图（类似一般的色谱图）可进行定性和定量分析，等离子体色谱的最大特点是灵敏度非常高，可以测定0.1μg·L^{-1}以下的物质，对大气中痕量污染物的测定是一种有效的方法。

等离子体损失峰 plasma loss peak 在XPS分析中，任何具有足够能量的电子通过固体时，可以引起导带“电子气”的集体振荡而产生能量损失。由于连续受到多次损失，故而在图谱上呈现一系列等间距的峰，强度逐渐减弱，叫等离子体损失峰。通过对等离子体损失峰的观测，可以研究物质表面氧化的情况。其属于电子能谱的指纹峰，在俄歇电子能谱以及电子能量损失谱中均存在该现象。它可以分为表面等离子体损失峰和体相等离子体损失峰。

等能量同步荧光光谱法 equal energy synchronous fluorescence method 同步荧光光谱法的一种。以能量关系代替波长关系，在两个单色器的同时扫描过程中使激发波长与发射波长之间保持固定的能量差，这种方法称为等能量同步荧光光谱法。它尤其适合于多环芳烃的鉴别和测定。由于室温和低温情况下多环芳烃的振动谱带间隔基本相同，大约为1400cm^{-1}，该值与光谱区域无关，因此在多环芳烃混合物的测量时可以方便地用一个能量差值进行整个光谱的扫描。而且当

这种方法与低温技术配合时可以获取更多的光谱特征，可作为一种“筛选型”分析手段。

等色点光度法 isoabsoption point-spectrophotometry 亦称等吸收点光度法。双波长分光光度法中的一种。若在试样溶液中含有 x 和 y 两个吸收光谱严重重叠的组分，为了使测定 x 不受 y 的干扰，可在 y 的吸收光谱上选出具有相同吸光度的两个波长 λ_1 和 λ_2，作为测定波长测定吸光度 A_1 和 A_2，则其差值 ΔA 与 x 的浓度呈线性关系而与 y 无关，即

$$\Delta A=(\varepsilon_x^{'}-\varepsilon_x)c_x \quad (b=1\text{cm})$$

式中，$\varepsilon_x^{'}$、ε_x 分别为 x 在 λ_1 和 λ_2 处的摩尔吸光系数。

等速电泳-毛细管区带电泳耦合进样 isotachophoresis injection-coupled with capillary zone electrophoresis 用两根内外径相同的毛细管对接，上段为等速电泳（ITP）级，下段为毛细管区带电泳（CZE）级，两级分别装有检测器 D_1 和 D_2。样品由进样阀或注射器定量注入 ITP 毛细管后，开始等速电泳富集。当区带经检测器 D_1 到达接口处时，通过控制阀门从接口处排除基体组分。然后将样品组分转移到 CZE 毛细管中，在除去样品基体后，在 CZE 毛细管中完成分离。这种装置有较高的浓缩效果，可将进样体积浓缩 100 ~ 1000 倍，从而大大减少 CZE 负载，降低检测限，扩宽定量线性范围，非常适用于复杂生物基体中微量成分的分离。

等温原子化 constant temperature atomization 亦称恒温原子化。在石墨炉内壁与炉内气相温度达到平衡后，试样从石墨表面蒸发进入气相实现原子化的过程。石墨炉通常以低电压大电流方式加热，从室温逐步或分步上升到原子化温度，在整个加热过程中，炉温随时间而变化，即时间的不等温性。炉内不同区域的温度分布亦不均匀，炉中心温度高于炉的两端和进样口的温度，即空间的不等温性。炉内温度分布的时间和空间不等温性，导致基体干扰和分子干扰。实现等温原子化的方法有：提高升温速率与原子吸收峰出峰时间延迟。前者如采用电容脉冲放电和最大功率升温，使基体化合物分子迅速完全解离并逸出石墨炉，以消除分子吸收和光散射的干扰，被测元素迅速原子化，获得锐吸收峰。后者如平台原子化和探针原子化，它们依靠管的壁辐射热加热，其升温过程迟后与管壁，气相温度先于平台或探针达到元素原子化温度，原子出峰时间移到石墨炉管壁与气相温度达到基本稳定平衡之后，元素进入气相原子化，避免了已分解的分子重新结合和凝聚。

等吸光点 isoabsoption point 亦称等色点。指两种或两种以上化合物（或同一化合物的两种存在型体）的吸收强度相等处的波长。等吸光点的出现常提示两种化合物（或同一化合物的两种存在型体）的存在。

等效点 equivalent position 在对称图形中，一个点经某一指定的对称

元素作对称操作之后，与另外一个点完全重合，那么这两个点就互为等效点，亦称对称等效点。在晶体学中，等效点可以代表晶体外形多面体上的宏观晶面，也可以代表结构基元或晶胞中的坐标点。等效点之间的等效关系不但指它们在几何形状上一致，而且在物理和化学性质上也完全一样。

等效电子电路 equivalent electron circuit 将某一电极反应过程中串连与并联的步骤所涉及的能量按反应阻抗用一种电子电路来描述，当它得到实际电极过程所测得的各个参数的验证时，便称之为该电极过程的等效电子电路。

等效声级 equivalent sound level 是噪声的主观评价方法之一。声级是指声场中某点相应于在可听频域内，按照特定频率计权而合成的声压级值。当噪声随时间而变动时，用等效声级评价。某一段时间内的A声级（与人耳对噪声感觉性能）按能量的平均值称为等效连续A声级，简称等效声级或平均声级。用公式表示为

$$L_{Aeq}=10\lg\frac{1}{T}\int_0^T 10^{0.1L_A}\,dt$$

式中，L_{Aeq} 为等效声级，单位为分贝；T 为总时间；L_A 为瞬时A声级。如果噪声是稳态的，等效声级就应该是噪声的A计权声级。

等效衍射 equivalent reflection 对应于倒易空间中由晶体所属的点群对称性联系起来的一组点阵点的衍射，称为等效衍射。等效衍射的衍射强度理论上应该是相等的。

等压质量变化测定 isobaric mass-change determination 在程序控制温度下，当挥发物的分压恒定时测量物质的平衡质量与温度关系的一种技术。该法适用于研究具有重叠反应的热分解过程，例如利用此法可确定 $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ 的脱水反应机理。$MgSO_4 \cdot 7H_2O$ 的脱水机理为：首先在50℃和95℃下熔融，然后脱掉四个水分子形成 $MgSO_4 \cdot 3H_2O$，此时 $MgSO_4 \cdot 3H_2O$ 固体及饱和溶液和水蒸气构成三相体系，该饱和溶液的沸点为105℃，在115℃ $MgSO_4 \cdot 3H_2O$ 分解形成 $MgSO_4 \cdot 2H_2O$ 和 $MgSO_4 \cdot H_2O$ 组成的混合物，在150℃ $MgSO_4 \cdot 2H_2O$ 失去一个水分子生成 $MgSO_4 \cdot H_2O$，高于310℃，硫酸镁的结晶水全部脱掉。

低分辨质谱仪 low resolution mass spectrometer; LR-MS 分辨率在1000以下的质谱仪。单聚焦质谱仪、四极质谱仪、不带反射静电透镜的飞行时间质谱仪都属于低分辨质谱仪。由于这种质谱仪的分辨率低，测定的质量精度也低，但与高分辨质谱仪相比，价格和维护费用要低得多，并且操作简单。这类仪器要比高分辨质谱仪应用更广泛。

低负荷柱 low load column 又称低容量柱。只能承受较低样品量（溶质绝对量）的色谱柱。目前使用的高效分离柱的容量一般来说都比较低，因为低负荷柱的分离效率高，适合于进行多组分、低含量样品的分析。

低密度脂蛋白 low density lipoprotein; LDL 血浆低密度脂蛋白颗粒是血浆极低密度脂蛋白脱脂和载脂蛋白交换后的代谢产物。颗粒直径20～25nm，密度1.01～1.063，含脂类75%，核心为胆固醇和甘油三酯。它的载脂蛋白主要是载脂蛋白B。低密度脂蛋白中的胆固醇占血浆总胆固醇的65%～75%，动脉硬化患者低密度脂蛋白胆固醇增高，与冠心病发病呈正相关。低密度脂蛋白经受体途径代谢，血清作脂蛋白电泳时，低密度脂蛋白泳动在β球蛋白区，其参考值为（53.1±5.1）%。

低能电子衍射 low energy electron diffraction; LEED 用较低能量（10～500eV）的低能电子束入射到样品表面产生的衍射现象。由于样品晶体中的原子按一定规则排列，故对电子束将起到衍射作用，能观察到其衍射图像。因为这个能量的电子束的波长大约为0.05～0.4nm，与原子间的距离相当，这样的弹性散射电子只能来自样品表面0.5～1nm的深度，因此低能电子衍射是一种灵敏的表面检测手段。其揭示的主要是表面原子的排列结构，因此经常用来研究单晶表面的结构以及外来物质的吸附和表面反应过程的表面结构变化。此外，通过衍射斑点，可以计算出表面的原子结构和晶格参数。

低能离子散射谱 low energy ion scattering spectroscopy; LEISS 用较低能量（一百至几千电子伏）的离子入射到固体表面，检测离子经表面碰撞后背散射出来的入射离子，测量它们碰撞后损失的动能所得到的谱图。用低能离子散射谱可以获得有关表面原子的种类及晶格排列的信息，在多相催化剂、原子扩散、合金的分离、氧化、腐蚀的研究中有重要的应用。低能离子散射谱是单原子层检测技术，给出的是表面第一层原子的信息，是一种真正的表面分析技术。

低能碰撞 low-energy collision 一般发生在四极质谱和离子阱类型的质谱仪中。在这类仪器中，离子只有数十电子伏特的加速电压，在进行碰撞活化时，碰撞能量很低，只有10～100eV，碰撞后的内能也低，产生的碎片较少，因此低能碰撞的信息量不如高能碰撞多。

低能损失扫描电镜 low energy loss scanning electron microprobe 当低能电子束与固体表面发生相互作用时，电子束的能量会产生损失。利用低能损失电子来成像的扫描电镜称为低能损失扫描电镜。在电镜分析中，所测得的背散射电子能量分布中，在入射电子能量附近有一个峰，与对应入射电子的能量差很小，叫低能损失电子。采用这种能量损失电子成像，所得图像叫低能损失像。一般根据元素的特征损失能量的分布还可以获得元素的分布像。

低浓化学 chemistry of low concentration 研究元素处于高度稀释溶液中的一些物理化学特性的一个化学研究领域。特别在放射化学研究中，放射性溶液的浓度非常低，通常处于

$10^{-20} \sim 10^{-10}$ mol · L^{-1} 水平，加入沉淀剂，不能形成独立的沉淀相，而是以胶体粒子分散在溶液内，或被器皿壁所吸附，这是它的一个重要特点。

低频电子自旋共振 low frequency ESR 一般认为微波频率低于 X 波段的称为低频电子自旋共振。在低频情况下水的介电损耗较小，低频电子自旋共振适合用于研究含水样品，特别是生物体系样品。参见**高频电子自旋共振**条。

低容量柱 low capacity column 又称低负荷柱。参见**低负荷柱**条。

低通滤光片 low-pass filter 截止滤光片的一种，它的带通区（允许光通过的光谱区）在短波长区，即它可使波长短于该滤光片标示波长的光通过，而使波长长于该滤光片标示波长的光被滤掉。

低温恒温器 cryostat 是进行低温或变温 ESR 测试的附件。当用插入式杜瓦瓶时，只能进行液氮或液氦温度下的 ESR 测量，且低温保持时间较短。低温恒温器可克服这些缺点。低温恒温器的特点是可将液氦从大的杜瓦瓶直接传送到插入谐振腔内的玻璃双层套管的底部，从而可以保证样品处的温度达到 10K 或更低。低温恒温器具有真空层和自保温层等多层保温措施。自保温层实际上就是在传送管中心的液氦传送管外面再加一液氦层（利用输送到玻璃双层套管的底部的一部分液氦的回流），更利于保持内部的低温。

低温红外光谱 low temperature infrared spectra 见**傅里叶变换低温红外光谱**条。

低温灰化法 low temperature cinefaction 利用低温等离子体发生装置，在较低温度下使试样氧化分解。等离子体装置分解试样的工作原理是在高频电场（约 13 MHz）振荡下，氧形成氧等离子体。氧等离子体是氧分子以及由高频振荡而产生的激发态氧分子、氧离子、氧原子、电子等混合组分的总称。这些组分具有极强的氧化能力，可使大多数生物样品在低温下迅速灰化。该方法所需温度低，大大减少了待测物的挥发和吸附损失，使灰化趋于彻底。再加之炭粒残存量少，降低了炭的吸附损失，提高了回收率，且无需外加超纯试剂，空白值低，故为较理想的处理样品的方法。

低温磷光法 low temperature phosphorimetry; LTP 从第一电子激发三线态（T_1）回到基态（S_0）时伴随的光辐射现象。三线态的寿命较长，激发态分子容易发生 $T_1 \to S_0$ 的内转换去活化过程，而且容易与周围的溶剂分子发生分子间碰撞或发生某些光化学反应而去活化，因此通常将待测物溶解于提纯后的乙醚、异丙烷、乙醇等的混合溶剂中，在低温下（液氮温度，77K）测定所形成的明净的刚性玻璃体的磷光，这种方法称为低温磷光法。近几十年来室温磷光技术得到了长足的发展，可以更方便、快捷地进行磷光测定。

低温色谱 low temperature chroma-

tography 在低温下操作的色谱方法。用于热稳定性差或需要在低温下才能维持活性的生物样品的分析。

低温荧光法 low temperature fluorimetry 室温下，化合物的荧光光谱多呈现峰形较宽的带状。而多种荧光体混合，特别是化学结构相近或有同分异构体或衍生物共存时，谱带重叠严重，很难鉴别和测定。但在低温和一定条件下，发光体可以给出尖锐的荧光谱线，从而可能对荧光体进行指纹识别或对混合物中某些组分进行定量测定。已提出了多种低温荧光法，如利用 Shpol'skii 效应的冷冻溶液荧光法、基体隔离荧光法、蒸汽相基体隔离荧光法、有机玻璃体中荧光狭线法、超声喷气法和超声喷气同步荧光法等。低温荧光法选择性高，为提高灵敏度，多采用激光光源。

低温原子化法 low-temperature atomization 利用某些元素（Hg）本身或其氢化物在低温下的易挥发性，将其导入原子化器内在较低的温度下产生原子蒸汽的方法。该法包括氢化物发生法和低温汞原子化法。前者是将 Ge、Sn、Pb、As、Sb、Bi、Se、Te、Tl 等元素化合物用还原剂（常用的还原剂是 $NaBH_4$ 或 KBH_4）还原为氢化物，或用电化学还原法发生氢化物，再将氢化物导入原子化器进行原子化。后者是将汞化合物还原为金属汞，产生汞蒸气，或者先将汞化合物转变为易于气化的形态，如汞的双硫腙螯合物，再将螯合物加热分解产生汞蒸气，用泵将汞蒸气导入气体吸收池内进行测定。低温原子化法一般不受原试样中存在的基体的干扰，有很低的检出限。

低压冻干法 lyophilization 简称冻干法。是在真空中将样品冷冻，然后以升华的方式将水分除掉的方法。该法可用于除掉生物组织中的水分和水中痕量杂质的测定。

低压火花光源 low voltage spark photosource 火花放电是在大气压下两电极间的一种气体放电现象。当两电极间的电压很高时，在电极间隙的带电粒子加速运动，产生碰撞电离，使电子和离子的数目急剧增加，放电即沿着电子聚集最密的通道进行，形成数条耀眼的发光。在通道与电极表面接触的区域，火花放电释放出大量的能量，使物质以发光的蒸气喷出，形成火舌。在通道和火舌的中心，气压可达数百个标准大气压以上，温度可达 10000K 以上。因此，火花光源具有比弧光光源强得多的激发能力和电离能力，能够激发原子和离子的光谱。各种火花放电都是利用并联到放电间隙的电容器而产生的，故称电容火花放电。为了提高火花放电的功率，可以采用较高的电压或者采用较大的电容，前者称为高压火花，后者称为低压火花。低压火花线路与低压交流弧光线路大致相同，工作原理也相似。

低压交流电弧 low voltage alternating current arc 交流电弧是利用交流电在分析间隙发生电弧放电时产生的高温来激发试样光谱的光源。它是发

射光谱分析常用的一种光源。由于它比直流电弧的放电稳定性好，因此应用也比较广泛。根据所用交流电的电压高低，交流电弧分为高压交流电弧（high voltage alternating current arc）和低压交流电弧两类。目前光谱分析用的交流电弧绝大部分是低压交流电弧。低压交流电弧的电压大部分采用220V，个别采用380V，看谱分析用的交流电弧光源，一般采用110V。低压交流电弧发生器由高频引燃电路与低压电弧电路组成。交流电弧既具有电弧放电特性，又具有火花放电特性。交流电弧的电极温度较低，电弧弧温较高，稳定性好。交流电弧放电是周期性的，每半周强制引燃，且每次引燃时在电极上有一个新接触点，即一次新的取样，使取样具有良好的代表性，故其精密度比直流电弧好。交流电弧的分析灵敏度接近直流电弧。

低压扫描电镜 low voltage scanning electron microscope; LVSEM 指电子枪的加速电压在1kV左右的扫描电镜。该扫描电镜具有如下特点：对未镀层的非导体试样充电效应最小；次级电子信息的产率高；获得的信息对表面更加敏感，边缘效应明显，可以从所得图像的原子序数衬度去分析表面氧化层的性质。

低压梯度 low-pressure gradient 又称外梯度。是在低压状态下完成流动相强度调整的梯度装置。只需一个高压泵，与等度洗脱输液系统相比，就是在泵前安装了一个比例阀，混合就在比例阀中完成。因为比例阀是在泵之前，所以是在常压（低压）下混合之后再增压输送到色谱柱的。

低压液相色谱 low-pressure liquid chromatography 通常指在蠕动泵所能达到的压力指标（如200kPa）下操作的液相色谱法。它类似于靠重力使溶剂自然渗透通过色谱柱的“经典”液相色谱。然而，因为使用了泵、进样阀和检测器，使整个操作连续化，还可实现自动梯度洗脱和馏分收集。在制备色谱中常用。通常使用玻璃或聚合物材料的柱管，因需用输液泵，故此分离系统比快速色谱复杂一些。

滴定常数 titration constant; K_t 滴定反应的平衡常数，用以衡量滴定反应的完全程度。例如用一强碱（NaOH）滴定一弱酸（HA），滴定反应为



$$OH^- + HA \rightleftharpoons H_2O + A^-$$

其滴定常数

$$K_t = \frac{[A^-]}{[OH^-][HA]} = \frac{[A^-][H^+]}{[OH^-][HA][H^+]} = \frac{K_a}{K_w} = \frac{1}{K_b}$$

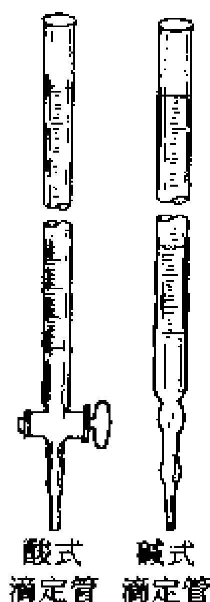
式中，K_w为水的离子积（25℃时$K_w = 1.0\times10^{-14}$）；K_a为HA的酸性常数；K_b为A^-的碱性常数。显然，为使滴定反应定量完全（反应进行99.9%以上），其$cK_t \geq 10^6$。

滴定碘法 iodometry 一种氧化还原滴定法，碘量法中的一种。以I^-

作为还原剂，与某种氧化剂反应生成 I_2，再用 $Na_2S_2O_3$ 进行滴定以测定这种氧化剂的方法称为滴定碘法或间接碘量法。

滴定度　titer; T　生产单位经常采用的一种表示浓度的方法。是指每毫升标准溶液相当于被测物质的克（或毫克）数，以 T_{M_1/M_2} 表示，M_1 是标准溶液溶质的分子式，M_2 是被测物质的分子式。例如，每毫升 $AgNO_3$ 标准溶液可与 0.01169gNaCl 反应，则此 $AgNO_3$ 标准溶液对 NaCl 的滴定度可表示为 $T_{AgNO_3/NaCl} = 0.01169g \cdot ml^{-1}$。若某次滴定用去此 $AgNO_3$ 标准溶液 23.25ml，则此试样中含 NaCl 的质量 $m = 23.25 \times 0.01169g = 0.2718g$。这种浓度表示法可以直接从滴定所消耗的标准溶液体积，方便地计算分析结果，对工厂等生产单位的例行分析很为适用。

滴定管　burets　容量分析中用来测定滴定溶液体积的仪器。它是主体是带有准确刻度的、细长而均匀的玻璃管。根据欲盛滴定溶液的性质要求，滴定管分酸式滴定管和碱式滴定管两种（参见右图）。酸式滴定管下端带有玻璃旋塞，用于盛放酸类溶液或带氧化性的溶液；碱式滴定管下端连接一小段橡皮管，内放一小圆玻璃珠（控制滴定速度），橡皮管下端又连接一尖嘴玻璃管，用来盛放碱类滴定溶液。有不同容量的滴定管，常量分析用的滴定管容量为 25ml 和 50ml，最小刻度为 0.1ml，读数可估计到 0.01ml；此外，还有 10ml、5ml、2ml 的半微量和微量滴定管，刻度更为精细。为避免或减少某些滴定溶液，如 $AgNO_3$ 溶液在日光照射下的分解，应使用棕色玻璃制成的滴定管。



酸式滴定管　碱式滴定管

滴定曲线　titration curve　容量滴定法中，滴定反应体系溶液的某种性质（如酸碱滴定过程中溶液的 pH 值，氧化还原滴定过程中溶液的电位和配位滴定过程中溶液的 pM 值等）对滴定百分数（或滴定剂体积）作图所得的曲线。当消耗滴定剂的量相对于被滴定物恰好相互作用完全时，称为化学计量点（旧称等当点），而在滴定剂的量处于比化学计量点所需的量少千分之一（−0.1%）到过量千分之一（+0.1%）时，滴定体系溶液的这种性质将发生突变，称之为滴定突跃，这种特性可用于滴定终点的判断。

滴定突跃范围　range of titration jump　容量滴定法中，当滴定剂消耗的量相对于化学计量点所需的量少千分之一（−0.1%）到过量千分之一

（+0.1%）过程中，滴定体系溶液的某种性质（如酸碱滴定过程中溶液的pH值，氧化还原滴定过程中溶液的电位和配位滴定过程中溶液的pM值等）发生突变的范围，称为滴定突跃范围。例如，若用0.10mol·L^{-1}的NaOH滴定0.10mol·L^{-1}的HCl时，消耗的NaOH的量在化学计量点前后±0.1%时，溶液的pH值约从4.30突变至9.70，即滴定突跃的范围为4.30～9.70。显然，滴定反应的平衡常数（滴定常数）愈大，反应物的浓度愈大，滴定突跃的范围愈大。

滴汞电极 dropping mercury electrode; DME 常用的一种指示电极。滴汞能经常保持新鲜的电极表面，不受生成物和不纯物吸附的影响，因此不必进行电极的磨光或洗净等前处理，电极的重现性好。具有很大的氢过电位，在一般金属电极上难以还原的化学物质，可利用滴汞电极研究其还原特性。

滴下时间 drop time 在极谱学中两个相邻汞（或其他液态金属）滴脱离毛细管端口的两个时刻间的时间差。

狄克松检验 Dixon's test 一种检验异常值的统计方法。在一组按数值大小次序排列的测量值中，若有异常值存在，则要不然数值过大，要不然数值过变小，因此，它必然位于在一组测量值的两端，只要对位于两端的被怀疑为异常值的测量值x_1或（和）x_n进行统计检验，就可确定该组测量值中是否存在异常值。当按下列统计量公式计算

$$\gamma_{10}=\frac{x_n-x_{n-1}}{x_n-x_1};$$

$$\gamma_{10}=\frac{x_2-x_1}{x_n-x_1}\qquad(n<7)$$

由实验值计算的统计量值，大于狄克松检验临界值表中相应显著性水平α和测量次数n的临界值$\gamma_{\alpha,n}$，则将x_1和x_n判为异常值，否则，不能判为异常值。当测量次数$n>7$，则按另外相应的统计量公式计算检验统计量值。当一组测量值中有一个以上的异常值时，狄克松检验法可用于异常值的连续检验和剔除。

底泥采样 sediment sampling 为了研究排入水体的污染物在底泥中的积累、分布、转化和迁移的规律需采集水体沉积物样品。底泥采样要考虑自然因素，也要考虑人为因素。江河底泥采样可在水文站水文断面同推移质、悬移质测验结合进行。测验取样点应中泓密，两侧疏。取样次数以能控制河道断面冲淤变化过程为原则，枯水期应多于丰水期和洪水期。在进行水体污染调查时为了全面了解水体污染情况及其变化，在污染源上游和远离污染源的河道分别设置对照断面、污染断面和净化断面。各断面上的采样点和测验次数取决于断面宽度和污染状况。小河或污染较轻的河道可以少些，大河和污染较重的河道则应多些，以能查清底泥的迁移状况和污染物积累变化过程为原则。海洋底泥采样一般与海洋地质调查或海洋综

合调查结合进行。采样点的布设随海洋调查的方式（路线采样、面积采样）而异。采样方法有表层采样和柱状采样。湖泊（或水库）的底泥采样一般仿照海洋底泥采样方式。在进、出湖泊的水道上应设置控制断面进行采样。在进出湖泊的主要入口附近，需增加采样点和采样次数。

底泥采样器 sediment sampler 调查湖泊、河流等陆地水体底泥状况时，多采集表层底泥样品。沙质底泥可用圆锥式采样器、钻头式采样器、悬锤式采样器取样。底泥为卵石时，则用锹式采样器、蚌式采样器。蚌式采样器应用较广泛，也可用于表层松软的底泥取样和底栖生物采样。海洋底泥采样器可分为拖曳式采样器、表层采样器和柱状采样器三类。拖曳式采样器在调查船低速航行时以拖曳方式采集表层底质和底栖生物样品。柱状采样器用于采集海底以下一定深度的柱状样品。国际海洋调查中广泛采用重力活塞采样器，中国较多使用方形刮底网。表层采样器用于在大陆架等浅海地区定点定量。

底水 bottom water 石油与水是互不相溶的两种物质，但在自然界中却常常混杂在一起，因此从地层中开采出来的石油通常要进行脱水处理。在生产处理过程中未被脱除的水，与石油一起被输送到油罐或油轮的船舱中，由于水的密度较大，分散在石油中的水经过一定时间的聚集、沉降后，最后沉积在油罐或船舱的底层，这部分水称为底水。在石油的检验计量中，必须去除这部分的水，才有可能使检验结果准确可靠。

地衣指示污染 lichen indicator for pollution 地衣是一种对大气污染十分敏感的指示植物，在二氧化硫年平均浓度为 0.015 ~ 0.105g · m^{-3} 时就能使地衣绝迹，可用来监测大气污染。没有地衣生长的地带成为“地衣沙漠”。1968 年在荷兰瓦赫宁根举行的大污染对动、植物影响的国际会议上，地衣与苔藓植物一起被推荐为大气污染的指示植物。使用方法一般是对地衣在污染区的种类、数量和分布进行调查或用人工移植进行定时定点监测。地衣对二氧化硫的敏感性依壳状地衣、叶状地衣和枝状地衣的顺序递增。

第一类错误 error of the first kind 在统计检验时，当原假设 H_0 为真而拒绝原假设的错误。检验统计量是随机变量，有一定的波动性，在进行假设检验时，即使原假设 H_0 为真，而由样本实验数据计算的统计量值仍有一定的概率 α 落入拒绝域内，从而错误地拒绝原假设 H_0。α 为犯第一类错误的概率，称为显著性水平。$1-\alpha$ 为当原假设 H_0 为真而做出正确判断的概率。α 越小，犯第一类错误的概率就越小。

第一信使 first messenger 蛋白质和儿茶酚胺类激素称为第一信使，携带信息到靶细胞。可通过细胞膜受体的作用又产生第二信使如 cAMP 等来实现激素在细胞水平上的调节作用。

第二类错误 error of the second

kind 在统计检验时当原假设 H_0 不正确而接受原假设 H_0 的错误。检验统计量是随机变量，有一定的波动性，在进行假设检验时，有时原假设 H_0 并不正确，而由样本实验数据计算的统计量值仍有一定的概率 β 落入接受区域内，从而错误地接受了原假设 H_0。β 是限制犯第二类错误的保证，β 越小，犯第二类错误的概率就越小。

第二类碰撞 the second kind of collision 已经激发的原子在和电子碰撞时，将激发能量传递给电子，变为电子的动能，而回复到较低激发态，甚至基态，但不发生光辐射，我们称这一类碰撞为第二类非弹性碰撞。对于光谱的激发而言，这一类碰撞是一种消极因素。

第二信使 secondary messenger 当激素与膜受体结合后，可以促发一系列反应，将膜外激素信号转化为靶细胞内某种化学成分，称为第二信使。如 cAMP、Ca^{2+} 等。再进一步调节细胞内各种代谢通路，产生多种生理效应。

第三元素影响 interelement effect 分析样品中除基体元素和待测元素外，尚存在其他元素，在光谱分析中这些元素被称为第三元素。光谱分析中由于样品中第三元素的存在所引起的被分析元素谱线强度（或分析线对的相对强度）变化称为第三元素影响。这种变化的原因主要归结为：（1）第三元素改变待测元素的蒸发情况；（2）第三元素对弧温产生影响，因而影响待测元素的激发和电离等。光谱分析中在制备和使用标准样品时要考虑第三元素影响，力求标样和分析样品之间在组分上尽可能一致。选择适当的光源工作条件有可能消除或减少第三元素的影响。

碲的价态分析 valence analysis of tellurium 在自然界，少量 Te 既可以金属存在，也可以氧化物的形式存在。+2、+4、+6 和 −2 是 Te 的主要氧化数，氧化数为 +6 的化合物较稳定。其氧化数不同，污染影响也不同。如经口吸入的可溶性亚碲酸（H_2TeO_3）在体内被还原成碲化物，一部分被甲基化，以二甲基碲的形式呼出，另外的主要排泄途径是粪尿。亚碲酸的毒性比碲酸或碲高。因此需要进行氧化态即价态的分析。

巅电流 summit current 在交流极谱、示差脉冲极谱、导数极谱、方波极谱以及类似的方法中，一种与物质有关的电流成分的最大值。通常这种电流成分是法拉第型，而极大的产生是因为电极反应速率随电位的变化速率具有一极大值。

巅电位 summit potential 在交流极谱、示差脉冲极谱、导数极谱和其他类似的方法中，当巅电流出现时，指示电极的电位。

点滴分析 spot analysis 又称点滴试验（spot test）。通过滴加化学试剂于金属或合金的清洁表面上，根据表面颜色变化所进行的快速无损定性分析。例如，为了鉴定普通钢和不锈钢，在试样表面滴加 1 滴硫酸铜的酸

性溶液，如立即出现紫红色，则为普通钢，否则可能为不锈钢。

点滴试验 spot test 一种只用一滴试液（0.001～0.05ml）即可完成微克级无机和有机化合物的定性或半定量分析的微量化学分析法。广义的点滴试验包括：（1）在滤纸或点滴板（白色或黑色带凹坑的瓷板）上用一滴试样溶液和一滴试剂反应；（2）以适当试剂浸渍滤纸，干燥后将一滴试样溶液滴加在滤纸上反应；（3）在固体试样（金属，岩矿，固体粉末及残渣）上滴加试剂反应；（4）固体试样和固体试剂一起烧结和熔融使其反应；（5）试样和试剂的反应产物萃入有机相而被检出；（6）检验微量气体，加试剂在被检物上，用载有显色剂的试纸检验发生的气体等等，基于观察所引起的颜色变化、沉淀或气体等特征进行鉴定。

点分辨能力 dot resolution 透射电镜的主要性能指标之一。其测定方法为用真空蒸发的方法将铂、铂-钯等金属或合金均匀地分布在火胶棉或碳支持膜上，在高放大倍数下拍摄这些粒子的像，从照片中找出粒子的最小间距，除以总放大倍数，即为相应电子显微镜的点分辨本领。在进行点分辨能力测定时，样品的制备必须非常小心。

点估计 point estimation 由样本数据估计总体分布所含未知参数的真值，所得到的值，称为估计值。点估计的精确程度用置信区间表示。

点花样 dot pattern 透射电镜的电子衍射图案的一种。当电子入射到单晶等样品表面上时，产生的衍射图案为一些点状图案，称为点花样。一般来说出现点花样的衍射是由单晶相所形成的，多晶相则形成清晰的衍射环，而非晶相则仅有模糊的衍射环出现。利用衍射点花样不仅可以用来判断样品是否是单晶相，而且可以从点间距计算出样品的晶格参数。

点群符号 symbol of point group 标明点群对称性的符号，常用的有国际符号和熊夫利斯符号（Schöenfilis symbol）两种。在国际符号中，简单对称轴以轴次的数字表示；旋转反轴在轴次数字上加“—”号；对称面以 m 表示；当对称面与对称轴垂直时，写作：4/m，当对称面与对称轴平行时，写作：4mm。在熊夫利斯符号中，用大写字母表示点群的对称型，如：C 表示只有一个对称轴，D 表示对称轴的组合，S 表示旋转反轴，T 表示四面体的对称轴组合，O 表示八面体的对称轴组合；在大写字母后面用下角标注明主轴轴次及对称面与主轴的关系，如：i 表示有对称中心，h 表示对称面与主轴垂直，v 表示对称面与主轴平行，d 表示对称面与主轴平行，且与垂直于主轴的对称轴斜交。

点样 sample application 用点样器以斑点的形式将样品滴加在色谱纸或薄层板上。一般先是把样品溶解在一种合适的低沸点（50～100℃）溶剂中制成溶液，然后再进行点样。点样时点样器端头的液体刚好与纸或薄层的表面相接触，样品溶液自然地被

吸附。点样量越少，分离后的斑点越清晰，越接近理想的圆点，点样的位置在距纸或薄层板下端约 1.5 ~ 2cm 处。点样的形式可以是圆形的斑点，也可以是比较窄的条形。

点样器 sample spotter（spot applicator） 色谱中用于滴加样品的工具。在纸色谱法或是薄层色谱法中，都需要将样品以斑点的形式滴加在色谱纸或薄层板上，加样量通常为 1 ~ 10μl（制备时样品量增大），可直接利用有刻度的平头微量注射器作为点样器。也可采用恒定体积的自动充注吸管，即带有变径的毛细管式滴管，在滴管中被吸样品溶液自动上升至变径处停下，保持一定的体积。将普通玻璃管的一端拉制成直径 1mm 的毛细管即可制作这种点样器。

碘量法 iodometric titration 利用碘的氧化性或碘离子的还原性进行滴定的一种氧化还原滴定法。当 I_2 作为氧化剂直接滴定还原性物质时，称直接碘量法（iodimetry），又称碘滴定法；当 I^- 作为还原剂，与氧化剂反应生成 I_2，再用 $Na_2S_2O_3$ 进行滴定的方法则称间接碘量法（iodometry）或滴定碘法。

碘值 iodine value 又名碘价。含双键的脂肪酸都可以和碘发生加成作用，测出一定量的油脂所吸收的碘量后，就可确定这个脂肪酸的不饱和程度。碘值定义为：在规定条件下，100g 试样消耗碘的量（以克为单位），即样品所能吸收碘的质量百分数。如果碘的反应力弱时，可用氯化碘、溴化碘代替，但最终应折算为碘。样品不饱和程度愈大，碘值也愈大。主要用于油脂、腊、脂肪酸的测定。

电场流分级 electrical field flow fraction 一种利用电场为分离驱动力的场流分级分离方法，用于带电粒子的分离与测定。它和传统的电泳方法很相似，要求有电场并且溶质带电荷。不同的是，电场流是一个淋洗过程，其保留参数是电泳迁移率和扩散系数的函数。这种方法也需要用半透膜作为柱槽的壁，目的是使小的离子可以透过膜进入相邻的电解室而保持柱槽内的电场强度不受干扰。目前已经用这种方法对简单蛋白质的混合物进行了分离。参见**交叉场流分级**条。

电池 cell 是化学能与电能互相转化的装置。它包括原电池和电解电池。能自发地将化学能转化为电能的装置称为原电池，而需要从外部电源提供电能迫使电流通过，使电池内部发生电极反应的装置称为电解电池。

电池电势 cell potential 一个电化学池中，当电流趋于零时，金属和金属，金属和溶液，溶液和溶液的相界面所存在的界面电势的代数和。

电穿孔术 electroptration 一种使细胞接受短暂的高压电冲击而把各种分子导入细胞中的方法，其可有效地将 DNA 引入到用其他方法难于转染的动物细胞（如 B 和 T 淋巴细胞）和植物原生质中去。放电的结果（在 10 ~ 100ms 的脉冲中有 250 ~ 1000V · cm^{-1}）在膜膜上形成毫微米

大的小孔，使得诸如螺旋或线状DNA等大分子能进入细胞。

电磁辐射激发X射线荧光分析 electromagnetic radiation X-ray excited fluorescence analysis 用X射线管激发产生X射线荧光进行定性定量分析的方法。它的优点是制样简单，可以直接分析原始样品；既能分析低含量样品，又能分析高含量样品；X射线的穿透能力强，能测定较厚样品中的元素平均含量。以同位素为激发源，可以制成便携式仪器，便于在野外和现场使用。若用电子同步加速器或电子贮存环发出的高强度偏振辐射为激发源，探测极限比带电离子激发X射线荧光分析低好几个数量级，再配以晶体单色器，可以制成同步辐射X射线探针用于微区分析。

电磁透镜 electromagnetism lens 用电磁场组成的电子透镜。主要是通过静电场和磁场的改变来使电子束聚焦的装置。利用静电场聚焦的称为静电透镜，利用磁场聚焦的称为磁透镜。磁透镜与静电透镜相比具有以下优点：（1）通过改变线圈的电流就可以控制磁场进行聚焦，而静电透镜需要高压；（2）在磁透镜中不存在击穿问题；（3）磁透镜的像差较小。磁透镜的性能主要取决于极靴，电磁透镜的极靴缺陷是产生像差的主要原因，而像差又决定其分辨率。

电磁增强模型 electro-magnetic enhancement model 一种解释表面增强拉曼光谱（SERS）增强机理的物理模型，认为表面增强拉曼光谱起源于金属表面局域电势的增强。表面镜像场模型是比较早提出的解释SERS增强机理模型之一。它认为SERS基体是一种很容易极化的自由电子气金属，吸附在金属基体表面的分子如一个点偶极子，位于吸附分子中心。在吸附分子点偶极子的作用下，金属中感应出镜像偶极子，这一对偶极子相互激励，使作用于吸附分子上的电场大大增强，从而使分子的拉曼光谱得到增强。但这个模型不能解释在0.2nm时还能观察到的SERS现象。

电催化作用 electrocatalysis 选择有效的催化剂制备电极以期达到降低活化能，提高电极反应速度的目的，这种作用就称为电催化作用。

电打孔 electroporation 在一定的电场作用下，生物膜的通透性发生较大的变化，形成许多微孔；当电场消失时，膜将恢复原来的状态。电打孔的技术已经用于生物给药，基因治疗等领域。

电导 conductance 电阻的倒数。溶液的电导在一定的条件下与存在于溶液中的离子数目、离子所带的电荷数及其淌度有关。而这些又与电解质的性质和强弱及电解质浓度的大小有关。

电导池 conductance cell 在电导检测器中，安装电极并让柱流出物连续通过的微型池。它是电导检测器的核心部分，其体积可以小至微升甚至纳升级，柱流出物从其一端流入，在流动的过程中，其电导被测定出来，然后从另一端流出。在电导池的两个

电极上施加一定的电压时，溶液中的离子就会定向移动，产生电流。溶液中离子的数目和离子淌度决定溶液电阻的大小。

电导池常数 constant of conductance cell 是任一给定电导池中电极间的距离 l 与电极表面积 A 之比，即 $\frac{l}{A}$ 为一常数。

电导滴定 conductometric titration 利用稀溶液中电解质的浓度与电导率成正比的性质确定滴定终点实现定量测定的方法。可用于酸碱、配位、沉淀滴定，特别是溶液浓度很稀、有色或浑浊、没有合适指示剂以及反应产物离解度大的情况。

电导分析法 conductive analysis 通过对试样溶液电导的测定获得有关体系的物理、化学信息的方法。例如可根据电导率的变化进行自动监测；在容量滴定过程中可利用电导的变化指示终点，进行电导滴定；在电化学里也常用电导的方法来进行物理化学常数的测定。

电导检测法 conductance detection 在离子色谱中，利用电解质溶液导电的基本原理，连续测定柱流出物的电导率，流动相的背景电导与样品离子电导的差值作为响应值记录在色谱图上。电导检测法是离子色谱中应用最广泛的检测法，离子色谱仪上通常配置电导检测器。其检测灵敏度可达 $\mu g \cdot L^{-1}$ 级，线性响应范围在 $10^3 \sim 10^4$。

电导率 conductivity 当导体的横截面积为 $1cm^2$、长度为 1cm 时的电导，单位为 $S \cdot cm^{-1}$（西·厘米$^{-1}$）。对于电解质导体，则相当于 $1cm^3$ 的溶液在距离为 1cm 的两电极间所具有的电导。

电动电势 electrokinetic potential 浸于溶液中的固体或胶粒，一般会因选择性吸附或固体分子的电离、表面带电，同时借静电作用吸引反离子，从而在界面区形成一个双电层，由于静电作用与热运动，双电层分成紧密层与扩散层。因反离子及固体表面的溶剂化，一部分溶剂分子进入紧密层，形成固液两相相对移动时的实际切动面。切动面与溶液深处（远离表面的电中性处）间的电势差称为电动电势。它的值是根据电动现象测定出来的。

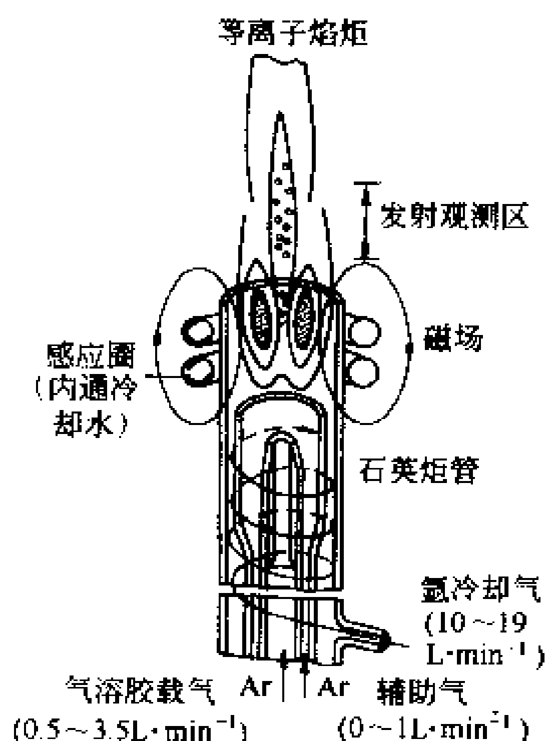
电动现象 electrokinetic phenomena 是指胶粒、固体微粒或多孔物质与分散介质的相对运动同电动电势相关联的一些现象，是电泳、电渗及流动电势、沉降电势等现象的总称。胶体能产生各种电动现象是其一重要特性。究其原因，在于胶粒与分散介质相接触的界面处存在一双电层而形成的电动电势。电动电势决定或影响着胶体的稳定性及光学、力学等各种宏观性质。同时，通过电动现象的研究，还可得到固液界面处双电层的微观信息。因此，电动现象的研究不仅具有广泛的实用性，且具有基础研究的性质。

电动序 electromotive force (emf) series 又称电化序。金属（包括氢）

按其电极反应的标准电极电位高低依次排列的顺序。在一定条件下反映了金属的活泼性。例如 K，Na，Mg，Zn，Fe，Ni，Pb，H，Cu，Hg，Ag，Au 为序列的一部分。位于序列前面的金属能把后面的金属（或氢）离子从它的溶液中置换出来。

电镀 electroplating 将被镀导电件作为阴极，在外加电压下使金属离子在其表面还原形成金属沉积层的过程。

电感耦合等离子体 inductively couple plasma；ICP 亦称电感耦合高频等离子光源。是 20 世纪 60 年代出现的一种原子发射光谱分析的新型激发光源。它由高频发生器、感应线圈和炬管、供气系统和试样引入系统三部分组成，其结构如右图所示。常用的是他激式高频发生器，频率多为 27.12MHz，最大输出功率为 2～4kW。感应线圈用铜管绕成。等离子炬管由三层同心石英管组成，外管以切向进气方式通氩冷却气，中层石英管通氩辅助气（有时可以不通氩气），内层石英管内径为 1～2mm，通氩载气，载带试样气溶胶注入等离子体内。炬管置于高频感应线圈的中央，在感应线圈内通电流后，产生轴向磁场，用高频 Tasla 线圈点火，形成的载流子（离子和电子）在磁场作用下，与原子碰撞，形成更多的载流子，当载流子多到有足够的电导率时，在垂直于磁场方向的截面上感生出流经闭合路径的涡流。强大涡流产生高热，形成白色耀眼的等离子炬。由于趋肤效应和气体动力学效应共同作用的结果，等离子体具有环状结构、环中心的温度较环周围的温度低，等离子体加热过程主要在环状边缘区进行，最高可达 10000K，环中心气流的扰动对等离子体的加热没有大的影响。载气能有效地载带试样气溶胶由内石英管注入等离子体内，被加热到 6000～7000K，使样品分解、原子化和离子化，并激发发射光谱。此种激发光源的优点是激发温度高，稳定性良好，在测光区信噪比高，检出限低，抗干扰能力强，自吸小，动态线性范围宽，达 3～6 个浓度数量级，应用范围广，可分析的元素多达 70 余种。不足之处是光谱干扰严重，测定非金属元素和气体的灵敏度不令人满意，设备和运行费用较高。



电感耦合等离子体电离（离子）源 inductively coupled plasma ioniza-

tion source; ICP IS 无机质谱仪的一种常用离子源。关于电感耦合等离子体的工作原理，参见**电感耦合等离子体**条。此方法被用于进行元素分析。其特点是灵敏度非常高，可检测低于 10^{-12}g 的溶液浓度。

电感耦合等离子体质谱仪 inductively coupled plasma-mass spectrometer; ICP-MS 一种多元素微量分析和同位素分析仪器。用电感耦合等离子体（ICP）作为离子源，样品通过 ICP 离子化，所产生的离子被引入质谱计进行分析。这种仪器灵敏度高，是目前进行无机元素分析的最有效工具之一。

电荷交换反应 charge-exchange reaction 亦称电荷转移反应（charge-transfer reaction），是化学电离中分子离子反应的一种方式。反应物离子与样品分子 M 之间进行电子转移的分子-离子反应



$$R^{+} + M \longrightarrow M^{+} + R$$

电荷耦合检测器 charge coupled detector; CCD 是一种新型的固态光电检测器，由许多个光敏检测阵元组成，每个阵元都是一个金属-氧化物-半导体（MOS）电容器。入射光投射到每个 MOS 电容器上时，光子透过电极和氧化层，在衬底半导体中产生一个电子-空穴对（电荷），并被吸引到电荷反转区中存储起来。产生的存储电荷数量与吸收的光子数量成比例，因此检测电荷量就可定量地获得光信息量。CCD 的检测阵元很多，可排成一维（线阵）或二维（面阵）。每个阵元尺寸很小，因此作光信号检测时有很高的空间分辨能力。将一定的驱动电压按照确定的程序依次加到每个阵元的电极上时，电极下存储的电荷可沿半导体衬底表面向一定方向逐次转移；经过多次电荷转移后每个检测阵元的光生电荷依次被送到输出端变成电流或电压信号输出。每个电极下的电荷转移后，在偏置电压作用下产生电子-空穴复合，电极下电荷消失，所以 CCD 的读出方式是破坏性的。由于 CCD 检测器量子效率高，因而检测灵敏度很高、检测动态范围大、器件尺寸小、坚固、读出噪声小，已成为各种现代光谱分析仪器广泛采用的新型光电检测或成像器件。

电荷耦合器件 charge coupled devices; CCD 一种新型固体多道光学检测器件，是在大规模硅集成电路工艺基础上研制而成的模拟集成电路芯片。由于其输入面空域上逐点紧密排布着对光信号敏感的像元，因此它对光信号的积分与感光板的情形颇相似。它借助必要的光学和电路系统，将光谱信息进行光电转换、储存和传输，在其输出端产生波长-强度二维信号，信号经放大和计算机处理后在末端显示器上同步显示出人眼可见的图谱。CCD 已经在光谱分析的许多领域获得了应用，主要优点是这类检测器的同时多谱线检测能力，和借助计算机系统快速处理光谱信息的能力，它可极大地提高发射光谱分析的速度。如采用这一检测器设计的全谱

直读等离子体发射光谱仪可在 1min 内完成样品中多达 70 种元素的测定；此外，它的动态响应范围和灵敏度均有可能达到甚至超过光电倍增管，加之其性能稳定、体积小、比光电倍增管更结实耐用，因此在发射光谱中有广泛的应用前景。CCD 由 3 部分组成：输入部分，包括一个输入二极管和一个输入栅，其作用是将信号电荷引入到 CCD 的第一个转移栅下的势阱中；主体部分，即信号电荷转移部分，实际上是一串紧密排布的电容器，其作用是储存和转移信号电荷；输出部分，包括一个输出二极管和一个输出栅，其作用是将 CCD 最后一个转移栅下势阱中的信号电荷引出，并检出电荷所运输的信息。

电荷势能模型 charge potential model 是指原子实内的电子位于原子核周围，距离外层价电子很远，芯电子好像处于空心静电球的内部，它感受到价壳层电子对它的势场作用。根据该模型，化学位移主要来自价电子转移引起的势能变化。

电荷守恒式 charge balance equation，CBE 任何电解质溶液必须是电中性的，即溶液中正离子所带的总电荷数必须等于负离子所带的总电荷数。依据此原则，考虑溶液中离子的浓度和所带电荷列出的方程，称电荷守恒式。它是处理溶液平衡问题时的重要原理和工具。例如，对 $NaHCO_3$ 水溶液，根据此原则，可将溶液中各带电组分浓度间的关系，即 $NaHCO_3$ 水溶液的 CBE，表示为





$$[Na^+]+[H^+]=[HCO_3^-]+2[CO_3^{2-}]+[OH^-]$$

电荷数 charge number 以电子电量 e 除一个离子的总电荷 q 得到的值。其整数值用 z 表示，$z=q/e$。

电荷远程裂解 charge-remote fragmentation 亦称作远离位置裂解（remote-site fragmentation）。在进行碰撞诱导解离时，远离电荷位置的化学键发生裂解的现象。特别是在高能碰撞诱导解离谱中常发生此种裂解，由于能给出较多的分子结构信息，通常用于结构解析中。对确定长烷基链以及烷基链中不饱和键的位置很有用。

电荷注入检测器 charge injection detector；CID CID 与 CCD 一样，是一种新颖的固态光电检测器，可把入射光信号转变成 MOS 电容器下的光生电荷，以电荷的形式存储和转移。CID 的光生电荷读出方式是非破坏性的，而且可以随意选取任何检测阵元的数据：每个检测阵元受到光照后，在其一个电极（积累电极）下产生电荷并予以积累；若积累电极的负偏压改为正偏压时，电荷反转区消失，积累电极下存储的电荷全部迁移到邻近的敏感电极下并予以定量检测。若积累电极恢复以前的负偏压，则光生电荷又从敏感电极重新回到积累电极，数量不变存储位置也不变，因此称之为非破坏性读出。CID 检测器有两个独立的行列扫描读出器，可独立动作从而可随意选出确定的行和列、读出任意一个检测单元的电荷信号。CID 检测器的结构较复杂、输出放大

器不在 CID 芯片上集成、读出噪声较大（相对于 CCD），应用 CID 检测器的商品分析仪器的开发，往往专利化，因此应用不如 CCD 那么广泛。

电荷转移分光光度法 charge transfer spectrophotometry 见**电荷转移吸收光谱**条。

电荷转移检测器 charge transfer detector 利用半导体 MOS 电容光生电荷存储和转移原理构成的新型光电阵列检测器，其工作原理不同于光电阴极材料产生光生电子从而获得光电流或光电压检测信号，而是基于 MOS 电容中的光生电荷的注入或移位而形成检测信号。电荷注入（CID）和电荷耦合（CCD）是两种不同类型的电荷转移检测器，由于种种技术/经济原因，CCD 的应用更为广泛，不但可用于光谱分析工作中，而且更广泛地应用于数字照相机等民用领域。

电荷转移络合物 charge-transfer complex; electron donor-acceptor complex 电子给体 D 与电子受体 A 相互接近时发生电子云重叠，根据 D 与 A 两者氧化还原电位的差以及溶剂极性的不同，两分子间发生部分电荷转移，其结果是产生电荷转移相互作用，生成（$D^{\delta+}\cdots A^{\delta-}$）型电荷转移络合物。

电荷转移吸收光谱 charge transfer absorption spectrum 金属配合物吸收光能时，因发生电子从金属离子向配体或相反方向的移动所产生的吸收光谱。这种跃迁包括电子从配体中的 π 能级或者 σ 键轨道激发到金属离子的空轨道，或者 σ 键电子激发到配体的空 π 轨道。这种跃迁实际上伴随着金属离子的还原和配体的氧化。电荷转移跃迁是极其强烈的，摩尔吸光系数 ε 一般在 $10^4 \sim 10^5$，光谱在紫外或可见区。电荷转移的容易程度随配体共轭程度增大而增大。电荷转移吸收光谱很适于微量金属的检出和测定。

电荷转移相互作用 charge transfer interaction force 分子间相互作用力的一种形式。一些化合物具有较强的电子接受能力（称为 Lewis 酸）。而另一些化合物则具有较强的电子给予能力（称为 Lewis 碱）。这两类化合物之间易形成电荷转移络合物（D-A 络合物）


$$D + A \longrightarrow (D\cdots A) \longrightarrow D^{+}\cdots A^{-}$$

通常在电子给予体分子中存在能量较高的已占分子轨道，因而具有相对低的电离势；而在电子接受体分子中有能量足够低的空轨道，因而具有相对高的电子亲和能。下列化合物为电子接受体：Pt^{4+}、Ag^{+}、Cu^{+}、BX_3、SbX_5（X 为卤素）为空轨道接受体；I_2、Br_2 等为 σ 接受体；SO_2、C_{60}、C_{70} 为 π 接受体。电子给予体化合物有：胺、酰胺、酮、酯、醇、醚、亚砜等，称为 n 给予体，卤代烷为 σ 给予体。芳香烃或烯烃的电子接受，给予能力与这些化合物上取代基的性质有关。具有吸电子性质的取代基，如 $—N(CH_3)_3^+$、$—CF_3$、$—NO_2$、—CN、$—SO_3H$、—X（X = F, Cl, Br, I）、

—COOH、—CHO、—COR、=O 等连接到苯环或双键上，生成强电子接受体。而具有推电子性质的基团如：$-NH_2$、—OH、$-C_6H_5$、$-CH_3$、$-NHCOCH_3$、$-OCH_3$ 等连接于苯环或双键上时，生成强电子给予体。电荷转移相互作用在光电子材料、分离化学中都有重要应用。例如利用银盐、亚铜盐浸渍的固定相可分离各种不饱和的化合物。

电荷转移作用 charge transfer interaction 具有电子给予特性的分子 D（称为电子给体，electron donor）与具有电子接受特性的分子 A（称为电子受体，electron acceptor）相互接近时，D 的最高被占分子轨道（HOMO）与 A 的最低空分子轨道（LUMO）会发生轨道重叠，形成从 D 向 A 发生电荷转移的共轭结构（D^+-A^-），使 D 与 A 接近的状态稳定，并发生 D 与 A 的结合。这种电荷转移结构多在紫外-可见区产生可以观测的电荷转移新吸收带。一般将引起电子给体向电子受体发生电荷转移、形成电荷转移结构的这种作用称为电荷转移作用。中性分子间的电荷转移作用并不强，如四氯化碳中电子给体六甲基苯与电子受体 1,3,5-三硝基苯相互作用的自由能为 $-4.6kJ \cdot mol^{-1}$，电荷转移作用所起的作用并不是很大。此时引起两者会合的驱动力还有偶极相互作用、色散力等。从电荷转移引起分子颜色变化的角度将这种弱的分子间作用力称为电荷转移作用，最近也有将这种作用力称为电子授受相互作用 EDA（electron donor-acceptor interaction）的。

电弧放电 electrical arc discharge 电弧放电是在大气压下两电极间的一种气体放电现象。参见电弧光源条。

电弧光谱 electrical arc spectrum 由电弧光源激发试样所产生的原子发射光谱。包括电极和试样产生的原子和离子谱线、试样中含有的未解离的和在电弧放电时产生的化合物的分子谱带及灼热固体辐射的连续光谱。

电弧光源 electrical arc photosource 电弧光源是一种利用电弧放电原理进行原子激发的光源，电弧放电所具有的能量，可使试样蒸发、解离和激发，从而发射辐射。发射光谱分析用的电弧光源有直流弧光和交流弧光两种，并有高压弧光和低压弧光之分。高压直流电弧和高压交流电弧，可以自动引燃，但操作很不安全，现已很少使用。低压直流电弧和低压交流电弧光源，操作比较安全，但需附加引燃装置。引燃方式主要有高频引燃和电子引燃，后者具有更高的稳定性。电弧光源的温度较高（4000 ~ 7000K），特别适用于岩石矿物发射光谱分析。电弧光源可以激发大多数元素的原子线和部分元素的离子线。根据所激发元素的原子光谱，对化学成分进行检测。直流电弧光谱，除用石墨或碳电极时产生氰带光谱外，通常背景比较浅。

电化学保护 electrochemical protection 根据电化学原理通过腐蚀电位的电化学控制以降低腐蚀速度的腐

蚀保护。主要有对可钝化金属，通过提高腐蚀电位到阳极钝化区域使其进入钝化状态而实现的阳极保护（anodic protection）和通过降低腐蚀电位使金属进入阴极状态而实现的阴极保护（cathodic protection）。

电化学传感器 electrochemical sensor 换能器是电化学检测器的传感器都称之为电化学传感器。例如，将葡萄糖作为底物的葡萄糖氧化酶敏感膜与过氧化氢电极组装一起便构成检测葡萄糖的电化学传感器。

电化学 DNA 传感器 electrochemical DNA sensor 利用单链 DNA（ssDNA）或基因探针作为敏感元件固定在固体电极表面，加上识别杂交信息的电活性指示剂（称为杂交指示剂）共同构成的检测特定基因的装置。其工作原理是利用固定在电极表面的某一特定序列的 ssDNA 与溶液中的同源序列的特异识别作用（分子杂交）形成双链 DNA（dsDNA），同时借助一能识别 ssDNA 和 dsDNA 的杂交指示剂的电流响应信号的改变来达到检测基因的目的。电化学 DNA 传感器是近几年迅速发展起来的一种全新思想的生物传感器，其用途是检测基因及一些能与 DNA 发生特殊相互作用的物质。

电化学当量 electrochemical equivalent 电解时通入 1C 的电量后在电极上所析出物质的量。

电化学发光 electrochemiluminescene；ECL 在一电解池中通过电化学反应得到的产物与溶液体系中存在的发光物质发生反应，并提供足够的能量使发光物质的电子由基态跃迁至激发态，并在其返回基态时发光的现象。电化学发光过程每毫秒循环几十万次，大大地提高了检测灵敏度。

电化学发光免疫分析 electrochemiluminescene immunoassay；ECLIA 把电化学发光技术与免疫反应相结合而形成的分析方法，具有很高的灵敏度和特异选择性，且快速方便，可广泛地应用于生化研究和检测。

电化学腐蚀 electrochemical corrosion 至少包含一种电极反应的腐蚀。电化学腐蚀是由于腐蚀体系中形成了腐蚀电池，金属/电解液界面上阳极区的金属进行溶解破坏被腐蚀的同时，还伴随着腐蚀环境中某些氧化剂在金属表面的还原。

电化学缓冲溶液 electrochemical buffer solution 电化学中可以使电解液保持一定的 pH 值且同时起着支持电解质功能的缓冲溶液。

电化学极化 electrochemical polarization 又称活化极化。当电流通过电极时，由于电极反应中某一步骤进行的迟缓性所引起的电极带电程度与可逆情况下不同而导致电极电势偏离平衡电势的现象。其特点是极化电流很小时，电极电势随电流的增长较快；反之，电极电势随电流的增长缓慢。

电化学检测器 electrochemical detector 基于被测溶质的电化学活性的检测器。其检测灵敏度高（最小检测量可达皮克级）、线性范围宽

(4个数量级)、选择性好和设备简单。但缺点是电极易污染、对温度和流动相流速敏感。电化学检测器主要包括安培检测器、库仑检测器、极谱检测器和电导检测器。

电化学疗法 electrochemotherapy 利用电化学的技术改变肿瘤细胞的生物生理学状态，在药物的辅助下达到治疗肿瘤的目的。例如，在一定的电场下，使位于两电极之间的肿瘤组织发生极化、氧化、变性以及发生一系列反应导致肿瘤组织的衰竭，从而起到治疗肿瘤的作用。

电化学免疫分析 electrochemical immunoassay; ECIA 将免疫技术和电化学检测相结合的一种有标记的免疫分析法。可应用于测定各种抗原、半抗原或抗体。

电化学生物传感器 electrochemical biosensor 由生物材料作为敏感元件，电极（固体电极、离子选择性电极、气敏电极等）作为转换元件的一种传感器。电化学生物传感器具有高度选择性，是快速、直接获取复杂体系组成信息的理想分析工具，已在生物技术、食品工业、临床检测、医药工业、生物医学、环境分析等领域获得实际应用。根据作为敏感元件所用生物材料的不同，电化学生物传感器分为酶电极传感器、微生物电极传感器、电化学免疫传感器、组织电极与细胞电极传感器、电化学DNA传感器等。

电化学石英晶体微天平 electrochemical quartz crystal microweighting; EQCM 将电化学电极与石英晶体组合在一起，通过电极下石英晶体的振荡频率的变化来测定电化学电极表面上质量的变化的一种电化学仪器。电化学电极表面上质量的变化将改变电极下石英晶体的振荡频率，是一种非常灵敏的检测方法，它能够测量10^{-9}g数量级的变化。目前该方法已应用于表面电化学研究。例如测量固体电极表面层中的质量、电流和电量随电位变化的关系，进而探讨界面电化学反应过程，电极上膜内物质的传输，存在于膜内的化学反应，膜生长过程动力学研究等。

电化学探针 electrochemical probe 是一种作为电化学反应的标记物且本身具有电化学活性的物质，通过它在电化学上发生的变化以指示电化学反应的发生过程。电化学探针广泛用于分离与检测，尤其是生物大分子的分离与检测中。

电化学位 electrochemical potential 对于带电的化学体系，在实物相α中，某组分的电化学位是把1mol的该组分在恒温恒压并保持α相中各组分浓度不变的情况下，移入α相时所引起自由能变化值，也即以可逆方式进行这一过程时所做的有用功。

电化学稳态 electrochemical steady-state 一般地说，在指定的时间范围内，电化学系统的参量（如电极电势、电流、浓度分布、电极表面状态等）变化甚微，或基本上可认为不变的状态。

电化学暂态 electrochemical transi-

ent 在指定的时间范围内、电化学系统的参量（如电极电势、电流、浓度分布、电极表面状态等）未达到稳态的阶段。

电极 electrode 在不同的学科领域，所指电极的含义不同。在电化学分析中，电极是指在电化学池中赖以进行电极反应并传导电流、构成回路的部件。一般分为活性电极和惰性电极两类。活性电极既传导电流也参与电极反应，如银电极插在含有银离子的溶液中。惰性电极只传导电流而不参与电极反应，如铂电极。电极材料可以是固体或液体的金属或半导体。在原子发射光谱等分析中，电极是指已加工成一定形状的，用来产生弧光、火花、直流等离子焰的碳或金属。金属和合金试样具有良好的导电性，可以直接用作电极。以试样直接作为电极的方法，称为自电极法。自电极法可以是两个电极均为试样，也可以采用一个辅助电极。岩石试样的导电性差，一般制成粉末，装在电极的孔穴中，送入光源。这种用来装放试样的电极，称为支持电极。用作辅助电极和支持电极的材料，主要有碳、铜和银等纯物质。碳质电极价格便宜，性能良好，加工方便，应用最广。光谱分析的碳质电极有炭棒和石墨棒两种，炭棒适用于分析难熔物质，石墨棒适用于分析易熔物质。

电极电势 electrode potential 又称电极电位。把金属插入含有该金属离子的溶液中，电极与溶液相面的接触处形成了电双层，在电极与溶液间就有了电势差，金属就变成了电极，具有一定的电势。任何金属电极都包含同一物质的两种状态：氧化态和还原态。当其与溶液界面接触时都会出现上述情况，只是电势差的大小和符号不同而已。目前尚无测量单独一支电极的电势的方法，只能选择一种参比电极，将其与待测电极组成一个原电池，通过测量两个电极的电势差，从而得到另一个电极的相对电极电势。国际上规定用标准氢电极作为参比电极中的基准电极，将其标准电极电势值定为0。实际上常用的标准电极是饱和甘汞电极，习惯上称为参比电极。

电极反应 electrode reaction 有电流通过时，在电极/溶液界面上发生的电化学反应。

电极反应的电子数 electron number of electrode reaction 是一个化学计量的数，等于在还原（或氧化）一个电极活性物质的离子或分子时，转移于电极和溶液间的电子总数。在此期间，溶液中已经存在的其他物质均不在电极上氧化或还原。

电极过程动力学 kinetics of electrode process 又称电化学动力学（electrochemical kinetics）。是研究电极过程的速度与机理的学科。当反应物在电极表面进行电荷转移时，往往伴随着表面层内反应物或产物的化学转化过程及反应物和产物在溶液中的传质过程（如扩散、电迁移和对流）。电极过程的速度则由这一连串过程中最缓慢的步骤（速度决定步

骤）所决定，因此研究电化学过程的速度，必须首先确定速度决定步骤、测定其速度及该速度同各影响因素之间的关系。研究电极过程动力学，发展测量各动力学参数的方法与技术，不仅对改善和发展化学电源、电镀、电解、腐蚀与防腐及电化学分析等都具有重要意义，而且也将促进电化学基础理论的发展。

电极活性物质 electroactive substance （1）在伏安法和类似的方法中，在电荷转移（即电极反应）一步中，或改变氧化态，或破裂化学键的物质都称电极活性物质。（2）在离子选择电极电位法中，含有被检测离子或与被检测离子处于离子交换平衡状态的物质称为电极活性物质。电极活性物质通常被结合到一个惰性基体，如硅橡胶或聚氯乙烯中。

电解 electrolysis 当直流电通过某种电解质溶液时，电极与溶液界面发生化学变化，引起溶液中物质分解的现象。

电解池的电量 quantify of electricity 在 t_1 和 t_2 时间间隔内通过电解池的电量，记为 Q。可由下式求得

$$Q = \int_{t_1}^{t_2} i_t \mathrm{d}t$$

式中，i_t 为在该时间间隔内任何一个时刻的瞬时电流。对于电极活性物质的还原反应产生的电量给予负号；氧化反应所产生的电量给予正号；总电量的各个成分应按相应的电流命名并给予相似的符号。

电解分析法 electrolytic analysis 又称电重量分析法。是将被测溶液置于电解装置中进行电解，使被测离子在电极上以金属或其他形式析出，由电极所增加的质量求算出其含量的方法。有时作为一种分离的手段，用于除去某些杂质。

电解抛光 electrolytic polishing 将欲抛光的导电件作为阳极通过电解整平使表面抛光的方法。

电解食盐法 electrolytic common salt process 是制造烧碱和氯气的重要方法。在盛有精制食盐饱和溶液的电解槽内通过直流电时，即发生电解反应。在阳极生成氯气，在阴极生成烧碱溶液和氢气。烧碱溶液经蒸发后可制得液体或固体烧碱。氯气和氢气可合成盐酸分别加以利用。此法所用的电解槽以隔膜式电解槽为最普通，水银电解槽则用于制造高纯度烧碱。

电解水 electrolytic water 在水中放入两根电极，然后在两端加上电压，由于纯净的水电阻很大，一般使用硫酸或氢氧化钠水溶液做实验，接电源正极的电极上产生氧气，接电源负极的电极上产生氢气。

电解抑制器 electrolyze suppressor 利用电解原理来抑制流动相背景电导的一种离子色谱抑制器。如阴离子分析中所用的电解型阳离子抑制器的原理就是将水电解生成 H^+ 和 OH^-，只有 H^+ 能通过阳离子交换膜进入流动相（NaOH 水溶液）中，将 NaOH 中和，使流动相变成电导率极低的水。电解抑制器可抑制 100 mmol · L^{-1} 的酸性或碱性流动相。

电聚合高分子包埋法 electropolymerization macromolecule embedment 将单体和生物功能物质如酶，同时混合于电解液内，通电使单体在电极表面电聚合成高分子，同时将酶包埋于高分子膜内，直接固定于电极表面，以构成生物传感器的方法。

电离 ionization 中性原子或分子失去电子或捕获电子，生成离子的过程。在质谱分析中，指气相、液相、固相中的样品被变为气态的正离子或负离子过程。

电离电位 ionization potential 当原子获得足够大的能量而其一个或某些外层电子脱离该原子核的作用力范围，成为自由电子，这时原子由于失去电子而成为离子。这种现象称为电离。为使原子发生电离所需的能量称为电离能，也称电离电位，以电子伏特为单位。原子失去一个电子，称为一次电离；失去两个电子称为二次电离，依次类推。产生不同程度电离的电离电位是不同的。

电离度 degree of ionization 体系中电离原子浓度与总原子浓度之比称为电离度 x。根据电离平衡

$$x=\frac{[M^+]}{[M]+[M^+]}=\frac{[M^+]}{[M]_T}$$

式中，$[M]$、$[M^+]$ 和 $[M]_T$ 分别是体系中自由原子浓度、离子浓度和原子总浓度。根据沙哈（Saha）方程，原子电离度 x 的大小与原子蒸汽的分压 p、原子的电离电位 V_i、体系的温度 T 的关系是

$$\log\frac{x^2}{1-x^2}=-\log p-\frac{5040V_i}{T}+\frac{5}{2}\log T-B$$

式中，B 是常数。电离度 x 随 V_i 减小、温度 T 升高、原子总浓度 $[M]_T$ 减小而增大。电离度 x 与电离平衡常数 K 之间的关系是

$$\frac{x^2}{1-x^2}=\frac{K}{[M]+[M^+]}=\frac{K}{[M]_T}$$

K 亦随电离平衡常数 K 值增大而增大，因 K 值越大，原子的电离趋向越大。

电离干扰 ionization interference 由于原子在高温下电离而引起的干扰。电离电位低的碱金属在高温下几乎完全电离。电离使自由原子数减少，导致原子发射和原子吸收信号降低。从电离平衡移动的观点考虑，加入大量电离电位更低的碱金属元素，可以抑制电离电位较高的被测元素原子的电离，从而可以消除电离干扰。

电离缓冲剂 ionization buffer 又称电离抑制剂和消电离剂。参见电离抑制剂条。

电离截面检测器 ionization cross section detector 又称截面积电离检测器，其工作原理是：当载气分子进入带有放射源的电离室时，与放射源辐射出的 β 粒子碰撞而电离，得到纯载气的电离电流，当载气中含有被测组分时电流发生了变化，测定电流的变化，便可测定组分的含量。生成离子对的数目取决于放射源的放射性强度、β 粒子的能量，以及载气的电

离截面积。由于组分分子的有效截面积与其组成元素原子的有效截面积具有加和性的关系，因此这种检测器可以根据组分中各元素的原子截面积来预先计算其响应信号的大小。其线性范围几乎可以从0%至100%的浓度，对于所有组分都有响应信号，灵敏度较低，检测限约为$10^{-8}g \cdot s^{-1}$。

电离能 ionization energy 又称电离势。使原子发生电离所需的能量。元素基态的气态原子失去1个电子变为氧化数为+1的阳离子所需要的能量叫做第一电离能，通称电离能。由氧化数为+1的阳离子再失去1个电子变为氧化数为+2的阳离子所需要的能量叫做第二电离能。第一电离能比第二电离能数值为低。电离能反映了金属原子失去电子的难易，即说明了金属的活泼性，也说明了元素常呈现的氧化态。

电离室 ionization chamber; ionizing cell 在离子源内，样品与电子束或反应离子相互作用，生成样品离子的场所。

电离抑制剂 ionization suppressor 又称消电离剂。加入到体系中的可以抑制被测元素原子电离并提高自由原子浓度的物质。从电离平衡移动的观点考虑，在体系中加入大量电离电位更低的碱金属元素，在体系中产生大量的自由电子，使被测元素原子的电离平衡移向自由原子方向，从而抑制了电离电位较高的被测元素原子的电离、消除电离干扰。

电流 current 电荷的定向移动形成电流，是单位时间内流过某一截面的电量。

电流分析法 current analysis 在电化学分析法中以测量电流的大小或电流的改变来测定物质含量的方法。如极谱分析法等属于电流分析法。

电流效率 current efficiency 在一定的外加电压条件下，被测物质电极反应所产生的电解电流占通过电解池的总电流的比例，以%表示。

电毛细管曲线 electrocapillary curve 研究电极电位与金属-溶液间的表面张力关系的曲线。滴汞落下时间与电极电位的关系曲线和电毛细管曲线相同。

电毛细现象 electro-capillarity 1873年Lippmann用毛细管内汞的弯月面作为极化电极，电解池底部的汞层作为非极化电极，研究电解质溶液中汞表面张力随电位的变化，发现了汞的表面张力随外加电位的改变而改变的现象。用显微镜可观察出毛细管内弯月面位置的移动。

电偶腐蚀 galvanic corrosion 又称咖伐尼腐蚀。自然腐蚀电位低的给定金属与某自然腐蚀电位高的金属相接触，由于腐蚀电池的作用而引起腐蚀速度增大的现象，也被称为接触腐蚀。

电偶序 galvanic series 在某给定环境中，以实测的金属和合金的自然腐蚀电位高低依次排列的顺序。用电偶序可以预估电偶腐蚀的危险性。

电喷雾电离 electrospray ionization; ESI 质谱分析中使用电喷雾技

术实现离子化的方法。在输送样品溶液的毛细管出口端与对应电极之间施加数千伏的高电压，样品流在毛细管出口可形成圆锥状的液体锥（Taylor cone）。由于强电场的作用，引发正、负离子的分离，从而生成带高电荷的液滴。在加热气体（干燥气体）的作用下，液滴中的溶剂被汽化，随着液滴体积逐渐缩小，液滴的电荷密度超过表面张力极限（雷利极限），引起液滴自发的分裂，称为"库仑爆炸"，分裂的带电液滴随着溶剂的进一步变小，最终导致离子从带电液滴中蒸发出来，产生单电荷或多电荷离子。质子的加成可生成单价或多价正离子，而脱质子可生成单价或多价负离子。

电喷雾接口 electrospray interface 近年来广泛用于液相色谱-质谱联用仪的一种将接口和"软"电离技术结合在一起的装置。这种装置主要有一根内径 0.1mm 左右的金属毛细管喷嘴和一个能提供 3～8kV 电压的电源。金属毛细管喷嘴一般为多层套管，最内层是流出物，外层为辅助喷射气体或必要的添加剂。在电喷雾离子化过程中，几乎没有任何额外能量加到被分析化合物上，它是至今为止最"软"的电离方式。对于小分子化合物而言，用电喷雾离子化主要得到 $[M+H]^+$，$[M+Na]^+$，$[M+K]^+$，$[M-H]^+$等；对于像蛋白质一类的生物大分子来说，由于用电喷雾离子化可以产生大量的多电荷离子，可以利用一组多电荷离子计算出该化合物的实际分子量。

电歧视效应 the effect of electrical discrimination 在电迁移进样中，进样量除与进样电压和时间有关外，还与溶质的淌度有关。对淌度较大的组分进样量大些，反之则小些。这种在电迁移中，对被迁移溶质的歧视效应称电歧视效应。

电迁移传质 mass-transfer by migration 荷电粒子在电场力作用下迁移对传质的贡献。

电迁移进样 electrophoretic injection 把毛细管的进样端插入样品溶液，加上一个进样电压并维持一定时间，则样品溶液在电泳及电渗流的作用下进入毛细管中，然后将样品溶液换成电解质溶液进行电泳。

电热原子化 electrothermal atomization 用电热方法在石墨炉内将被测元素转化为自由原子蒸气的过程。电热原子化法是 1959 年里沃夫（B. V. L'vov）提出的。他当时使用的是坩埚石墨炉原子化器，用两路电源分别加热试样电极与石墨管吸收池。当今商品仪器使用的是多为改进的 Massmann 型管式石墨炉原子化器。它的优点是：（1）绝对灵敏度高；（2）选择性好；（3）样品用量小；（4）适用范围广，可以直接测定大约 60 种元素。

电热原子化器 electrothermal atomizer 以电为热源实现元素原子化的装置。它利用电阻发热体通以低压大电流，发热产生高达 3000℃ 的高温，使盛于原子化器内的试样蒸发和

原子化。广泛使用的电热原子化器有管式石墨炉、平台石墨炉和探针石墨炉。此外还有坩埚石墨炉、碳丝原子化器、金属原子化器等。随着横向加热原子化器的出现，又开发了其他形式的石墨炉，其特点是炉内温度分布均匀。

电容免疫传感器 capacitance immunosensor 基于双电层电容因分子识别作用而发生变化所制成的免疫传感器。通常生物分子都具有电荷，当通过特异亲和力接到电极表面时引起双电层电容的变化，借此可以测定反应物的浓度。它可连续地监测电容的变化来研究在电极表面发生的反应动力学过程，从而研究分子之间的相互作用。它的一般组成是，在金电极表面由硫辛醇形成自组膜，将单克隆抗体耦合在膜上作为识别层，当加入一抗原（无标记）时，电极的双层电容发生灵敏的变化，电容的变化值与被测抗原的浓度之间呈线性关系，动态范围可达三个数量级，检出限达 15×10^{-15} mol·L^{-1}。

电容耦合微波等离子体 capacitively coupled microwave plasma 微波等离子体是指通过微波与工作气体（Ar 或 He）的作用而产生的高温等离子体，从磁控管产生的微波通过同轴电缆连接至一金属空心管，当工作气体引入，并进行调谐时，一个明亮的火焰状等离子体即可在电极的顶部上方形成。微波等离子体光源是一种重要的原子发射光源。按照微波等离子体形成的方法和结构的不同，可分为两大类，即电容耦合微波等离子体（CMP）和微波诱导等离子体（MIP）。

电融合 Electrofusion 在电场的作用下，由于细胞膜通透性等膜性质的改变导致细胞的融合称为电融合。

电色谱法 electro-chromatography 将控制电位库仑分析用于流动体系测定的一种方法。在柱电极中填充玻碳粒等导电物质进行电解，利用 *IR* 降在柱中产生一均匀的电位梯度来测定。方法具有取样少（约 10μl），快速（约几十秒至 1min）的优点。可用于铀和钚的测定。

电渗（透） electroosmosis 在外加电场作用下，分散介质对固体分散相做相对移动的一种电动现象。例如在外加电场作用下，水在极细的玻璃毛细管（内径为 $10^{-8}\sim10^{-9}$cm）中向负极移动。产生电渗现象的原因是水和毛细管玻璃壁的界面形成了双电层，固体玻璃带负电荷，水带正电荷，在外加电场作用下带正电荷的水向负极移动。用浸湿的多孔物（如棉花、纸屑等）、压紧成块的粉末、素烧瓷等作隔膜，均可观察到电渗现象。工业上常用电渗现象驱赶水分。

电渗流 electroendosmotic flow 在毛细管中，电渗流指的是体相溶液在外加电场作用下整体朝一个方向运动的现象。

电渗流标记物 electroendosmotic flow marker 用于测定电渗流大小的物质，如硫脲等。

电渗流淌度 electroendosmotic mobility 类似于电泳，电渗流大小

用电渗流系数或电渗流淌度（μ_{eo}）表示，其大小为单位场强下的电渗流速度，即$\mu_{eo}=v_{eo}/E$。

电渗析 electrodialysis 在直流电场的作用下，利用离子交换膜使溶液中的带电离子选择性地透过而实现分离的过程。目前电渗析主要应用于海水脱盐、药品纯化、处理放射性废液以及纯水制备的前处理等。

电势滴定法 potentiometric method 又称电位滴定法。是向试液中滴加能与被测物质进行化学反应的已知浓度的试剂，在滴定过程中监测指示电极电势的变化，若反应按化学计量进行，根据反应达到计量点时被测物质浓度的突变而引起电极电位的突跃来确定滴定终点的方法。它属于容量分析范畴。因此，要利用这种方法进行测定，必须满足下列条件：（1）所依据的化学反应必须是定量的，有适当的滴定剂；（2）反应有较快的速度；（3）有合适的指示电极，以确定反应的终点。在酸碱滴定中一般采用pH玻璃电极为指示电极；氧化还原滴定可采用惰性金属电极为指示电极；在沉淀滴定和络合滴定中可采用离子选择性电极为指示电极。电位滴定法可用于有色、浑浊溶液或缺乏合适指示剂的沉淀反应的滴定体系，也可用于离解常数小于5×10^{-9}的弱酸或弱碱的滴定。

电势滴定曲线 potentiometric curve 在电势滴定法中，绘制滴定过程指示电极的电势（或测量电池电动势）对加入的相对应的滴定剂体积的关系曲线。

电势溶出法 potentiometric stripping analysis; PSA 在恒电位下预电解富集，将待测元素富集到工作电极上，然后利用化学试剂（氧化剂或还原剂）的氧化或还原作用使其溶出，同时记录E-t或$\frac{dt}{dE}$-E曲线，由此进行定性定量分析。此法具有高灵敏度和高分辨率，特别适合于分析痕量金属和混合金属。

电双层 electrical double layer 在电极与溶液间进行电极反应的很薄的一个表面层，是电极电势存在的位置所在。相界电势的形成是由于：（1）外电源通过辅助电极对电极充电，使电极金属将带净电荷，此时电极的溶液相将带符号相反的等量电荷；（2）界面上极性分子（包括溶剂分子，如水的偶极子的吸附或定向排列；（3）离子在界面上的吸附；（4）电极界面存在氧化还原电对，它们的氧化还原倾向表现为电极电势。以上电势产生的原因可以相互重叠，总的效果是在界面上产生正、负电荷的空间分离，但由于正、负电荷相吸引，故它们将比较紧密地或疏松地在电极界面排列，形成正、负两层或多层。电双层的结构和性质将对电极反应速度产生重要的影响。

电四极矩 electronic quadrupole moment 电四极矩是核的基本物理性质之一，反映核内电荷的分布。$I=\frac{1}{2}$的核，电荷在核上的分布是球

对称的，电四极矩为零。而 $I>\frac{1}{2}$ 的核，不仅有磁偶极矩，还有电四极矩，记以 eQ。其中 $Q=\frac{2Z(b^2-a^2)}{5}$，单位为 cm^2，式中，Z 为核电荷数，a、b 分别为旋转椭球半径，其中 b 是沿着旋转轴方向的半径。当 $b>a$ 时 eQ 为正，所以核的旋转椭球呈“橄榄”型，当 $b<a$ 时，eQ 为负，则呈“铁饼”型。研究具有电四极矩的核要比研究 $I=\frac{1}{2}$ 的核困难得多。核电四极矩在电场梯度的作用下引起了谱峰相当大地加宽。

电通透性 electropermissibility 在电场的作用下，生物膜通透性所发生的变化称为电通透性。

电位滴定 potentiometric titration 将滴定操作与电位测量相结合的一种分析方法。在试样溶液中浸入指示电极和参比电极，根据滴定过程中滴定剂体积与指示电极和参比电极的电位差的关系确定滴定终点。本法可用于酸碱、配位、氧化还原和沉淀滴定，也能应用于有色或浑浊溶液以及非水溶剂滴定中终点的判定。

电位分析法 potential analysis 由于电极电位与溶液中相应离子的活度之间的关系，可用 Nernst 方程式表示，因而通过测量电极电位，就可确定离子的活度（或浓度）的方法。电位分析法分为直接电位法和电位滴定法。它是一种经典的分析方法，可以测定其他方法难以测定的许多种离子，如碱金属和碱土金属离子、无机阴离子和有机离子等；使用的仪器比较简单，操作比较方便，易于实现分析的自动化，在测定平衡常数方面是个重要的手段。

电位检测器 electricity potential detector 基于测定指示电极表面相对参比电极的电势的检测器。

电位-pH 图 potential-pH diagram 又称布拜图（Pourbaix diagram）。用以表示水溶液中金属及其化合物热力学稳定性的电位和 pH 值的函数关系图。用以分析电极反应中各组分生成的条件及稳定存在的 pH-电位的范围，也可用以估计各种金属在不同的电位、离子浓度与 pH 值下所能存在的形态。

电压-扫描库仑法 voltage-scanning coulometry 在恒电压扫描下进行电解的方法。在靠近溶液的氧化-还原平衡电位处开始扫描，选择合适的扫描速度以维持电化学平衡。将电解电流积分，所得电量是电压的函数，可直接在 x-y 记录仪上显示。这个方法现已发展成为一个高灵敏度的痕量（$10^{-5}\sim10^{-7}\,mol\cdot L^{-1}$ 或 μg 级）分析方法，特别适用于镧系元素的电化学研究，并已制成自动扫描库仑计。

电压衬度像法 voltage contrast image 利用电压衬度效应来进行扫描以获得样品表面各处的电位分布的方法。其原理为：次级电子是一种低能粒子，其运动轨迹受样品的表面电位的影响，因此次级电子像中很容易显示出由样品表面存在的电位所引起的

衬度效应，即电压衬度。

电移谱 electrograph 一种利用电解原理进行检测的微量分析方法。通过电解，把金属样品表面的微量金属溶解为金属离子，直接渗入浸有电解液的载体上，由特效的显色或其他反应进行检出。电移谱方法只能用于导电物质的检测，具有简便、快速，取样少，不损坏试样等优点，是一种较好的定性检出方法。如果测试条件一致，将试样显色程度和标准样品作对比，也可以进行定量或半定量分析。电移谱方法可用于合金和钢的鉴定。如用于车间和材料场分辨混钢种，可以快速检出钢中镍、铬、锰、钼、铜、铝、钒等11种金属，使用方便。在生化方面，可用此法检测在动植物组织中以离子状态存在的一些成分。

电泳光散射 electrophoretic light scattering 利用激光光散射作为测定粒子在外电场作用下位移的一种方法。它将电泳与光散射相结合，利用电泳确定其表面电性质的特性，利用激光光散射准确地测定粒子的动力学性质，是精确地测定胶体粒子的电泳迁移率、电动电位、扩散系数、沉降速度、粒子的大小、比电导等性质的光散射技术。该技术具有测量速度快、分辨率高和适应范围宽等优点。

电泳淌度 electrophoretic mobility 单位场强下离子的平均电泳速度，即 $\mu_{ep}=v/E$。

电晕放电 corona discharge 给置于气体氛围中的针形电极施加很高的电压，使之具有强电场，从而发生放电，使放电针周围的气体电离，叫作电晕放电。在质谱分析中，它被用于大气压化学电离中，使反应气体离子化。

电致化学发光 electrogenerated chemiluminescence; electrochemiluminescence 利用电化学手段，通过电极给含有化学发光物质的体系施加适当的电压或电流，使其中某些成分在电极上产生氧化还原反应，从而产生了某种具有化学活性的物质，该物质能与发光物质反应并提供足够的能量，致使发光物质的基态电子跃迁到激发态，当激发态电子回到基态时便发出一定波长的光，称为电致化学发光。也可利用电极提供能量直接使发光物质进行氧化还原反应，并生成某种稳定的中间产物，该产物迅速分解导致发光。电致化学发光分析是基于电解过程中所产生的光的强度进行测量，目前电致化学发光分析使用最广的3种技术是：（1）在两电极之间施加一个交流电压，使得自由基阴离子和自由基阳离子能够在同一电极上交替产生，并从电极表面扩散，在溶液中保留相当长的一段时间，与溶液中某种发光物质反应，并提供足够的能量产生激发态分子或离子而发光；（2）采用高速旋转的环-盘电极，在环电极上施加一个交流（一般为对称双阶跃方波脉冲电压）或直流电压，而让盘电极保持一个恒定的电压，使处于电极中间的电解产物能迅速迁移出去，然后与环电极附近所产生的自由基离子进行反应；（3）在

两个相隔很近的电极之间施加一个直流电压，阴离子和阳离子在各自相应的电极上产生，并向对方扩散，从而在一个微小区域内发生反应而引起发光。

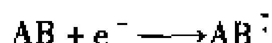
电重量分析 electrogravimetric analysis 见电解分析法条。

电着色 electrochromism 在电极或电极近旁发生氧化还原反应而产生鲜明的颜色变化或透光率变化的现象。

电子倍增器 electron multiplier 在电子能谱仪中用来放大检测微弱电信号的器件，是电子能谱仪的关键部件之一。在光电子能谱中被检测的电子流非常弱，而电子倍增器则可将所测量的信号放大而达到测量目的。其工作原理是当一个电子进入倍增器阴极时发生碰撞，产生多个次级电子，这些次级电子沿加速电场运动的同时，再一次与壁表面碰撞从而产生更多的次级电子，如此反复多次，最后在电子倍增器的阳极即可获得较容易测量的脉冲信号。一般电子倍增器的放大倍数在 10^8 倍左右，一般要求电子倍增器具有很高的放大倍数以及很低的信号噪音，并且存在一个放大坪区电压。

电子鼻 electronic nose 电子鼻是能对物体气味进行快速判定或定量分析的阵列传感器，其上每一个阵元都惟一对应于一定范围的化合物产生响应，各阵元对物体探测所得的信息数据通过计算机软件识别程序进行分析、给出分析判断或定量数据。各国已研制了种种嗅觉灵敏的电子鼻，可用于检测香水、化妆品，食品香料等挥发性化学物质，也可用于侦查炸药、毒品以及一些环境毒素。因为是通过气体分子运动进行检测，分析速度很快（10s 左右）。

电子捕获化学电离 electron capture chemical ionization；ECCI 利用化学电离分析具有卤素或硝基等化合物时，因为被分析物的电子亲和力很强，可以捕获一个电子生成负离子



$$AB + e^- \longrightarrow AB^{-\cdot}$$



或 $$AB + e^- \longrightarrow A^- + B^\cdot$$

对电负性高的化合物能得到高灵敏度的分析结果。

电子捕获裂解 election capture dissociation；ECD 由电喷雾电离生成的多质子分子离子 $[M+nH]^{n+}$，通过捕获低速的电子，在高激发态 $[M+nH]^{(n-1)+\cdot}$ 裂解的现象。此过程被认为是高能量的裂解。例如，对于多肽可给出 C 系列或 Z 系列的裂解碎片。

电子传递蛋白 Electron-transfer protein 生物体系内进行电子传递反应的蛋白质，如细胞色素 C，铁硫蛋白等。

电子传递链 electron transfer chain 生物化学中一连串的氧化还原反应受许多载体影响其电子传递。一个电子传递链也叫呼吸链，形成有氧呼吸的最后阶段。例如从 NADH 的脱氢反应，琥珀酸脱氢反应等到辅酶 Q 池，再从辅酶 Q 池到细胞色素氧化酶、

细胞色素还原酶之间的电子传递以及最后电子受体氧的还原和氢离子结合形成水。

电子磁矩 electron magnetic moment 电子的轨道运动所产生的磁矩称为轨道磁矩，以μ_l表示。它在外磁场Z方向上的投影μ_{lz}取决于磁量子数m。电子的自旋轨道运动所产生的磁矩称为自旋磁矩，以μ_s表示。它在外磁场Z方向上的投影μ_{sz}。电子的总磁矩$\mu_e=\mu_l+\mu_s$。总的角动量L为0的s态，电子轨道磁矩等于零，于是电子磁矩就是电子自旋磁矩。

电子电离（离子）源 electron ionization ion source 又称电子轰击离子源（electron bombardment ionization source）。一种最常用的质谱仪离子源，简称EI源。主要由阴极（灯丝）、离子室、电子接收极、一组静电透镜组成。在高真空条件下，给灯丝加电流，使灯丝发射电子，电子从灯丝加速飞向电子接收极，在此过程中与离子室中的样品分子发生碰撞，使样品分子离子化或碎裂成碎片离子。为了使产生的离子流稳定，电子束的能量一般设为70eV，这样可以得到稳定的标准质谱图。利用电子电离源可以得到样品的分子量信息和结构信息。但不适于分析易分解、难挥发的化合物。

电子-电子双共振 electron-electron double resonance; ELDOR 电子-核双共振（ENDOR）的响应表现在ESR吸收信号的增强，而在ELDOR实验中是记录样品受第2个微波场（取代ENDOR中的射频场）辐照时所产生的ESR信号强度的减弱。其基本原理是把抽运跃迁的饱和转变为观察跃迁的饱和，因而削弱了ESR的吸收，呈现出ELDOR信号。借助ELDOR的两微波频率之差可定量地测定超精细耦合常数，而且有可能把不同自由基相混合所形成的重叠波谱分离开。

电子俘获检测器 electron capture detector 对电负性化合物（能俘获电子的组分）具有特别高的灵敏度的一种选择性检测器。它的工作原理是，首先载气分子在电离室中被放射源发射的β粒子（高能粒子）电离，在电极之间形成一定的起始电流——基流，当被分离的电负性物质分子进入电离室时，自由电子会被该物质分子俘获而使基流降低，产生电信号输出。当用N_2作载气时，不同物质在离子室俘获电子所产生离子流与外加电压有关。检测限为10^{-12}g，线性范围为10^4。适合于含卤原子化合物、硝基化合物、有机过氧化合物、多环芳烃及有机金属化合物的痕量分析。

电子给体 electron donor; ED 电子的施体，具有失去电子的倾向。

电子轨道角动量 electronic orbital angular momentum 原子内电子相对于原子核作环绕运动的动量矩，以L表示。它的绝对值由角动量量子数（简称为角量子数l）决定

$$|L|=\sqrt{l(l+1)}\hbar,\hbar=h/2\pi$$

式中，l取值为0，1，2，…，($n-1$)。n为主量子数，l不同的电子的运动状态不同。$l=0$的电子态称为s态，电子云呈球形分布，$l=1$、2、3的电子态分别称为p、d、f态。

电子-核-核三重共振 electron-nuclear-nuclear triple resonance; EN^2TIR 电子-核-核三重共振是在电子-核双共振（ENDOR）基础上发展起来的。EN^2TIR不仅可显著提高信噪比，而且可以压缩线宽，提高分辨率，并可探索出对某一超精细耦合常数有所贡献的质子数。从核磁共振辐照方式看，对EN^2TIR一般分为两种情况。一种是特殊三重共振，在ENDOR中属于某一等性核的两个可能跃迁中仅有一个被射频所激发，从而解除ESR的饱和，而在EN^2TIR中两个核跃迁是同时受激发的。由特殊三重共振谱线的强度比可以估计出相应于某一特殊超精细结构的质子数目。另一种是普通三重共振，此时，同时用两个NMR频率来辐照与其相对应的两个非等性核。从观察某一个核的ENDOR信号强度的增强及另一个核的NMR跃迁被饱和的现象，可以判别出超精细耦合常数的相对符号。

电子-核双共振 electron nuclear double resonance; ENDOR ESR与NMR相互组合的双共振。其基本原理是：将外磁场固定在某一ESR吸收信号处，在用功率足够大的微波辐照顺磁体系使ESR吸收饱和后，再进行射频频率扫描使顺磁分子内发生核自旋的跃迁，这样已被饱和的电子自旋能级的布居数发生变化，导致饱和被解除，从而可以观测到恢复的ESR吸收信号。电子-核双共振（ENDOR）谱的横坐标是射频频率，纵坐标是ESR信号强度。进行ENDOR测试的前提是顺磁体系的ESR信号必需能够被微波饱和。ENDOR的最大优势是可大大简化自由基的复杂ESR谱，提高分辨率，确定更精确的超精细耦合常数。

电子激发X射线荧光分析 electron excited X-ray fluorescence analysis 利用电子激发产生X射线荧光进行定性定量分析的方法。以电子为激发源产生的韧制辐射本底比带电粒子为激发源产生的高二个量级，因此，其灵敏度比较低。但其优点是，用聚焦电子束激发样品表面微区产生元素的特征X射线，可以获得样品表面组成的信息，用它来观察元素在表面的分布和富集状况，测定合金、矿物、陶瓷等样品中的夹杂物和析出物等。

电子交换相互作用常数 electron exchange interaction constant 见自旋-自旋交换相互作用条。

电子朗德因子 electronic Lande factor 反映了电子自旋磁矩μ_s与电子轨道磁矩μ_l对总磁矩μ_e贡献的差别，以g表示。它的量纲为1。$g_e=1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$，对于电子轨道运动有$g_e=1$，电子自旋运动有$g_e=2$。

电子密度合成 electron density synthesis 电子密度函数是三维周期

函数，可用傅里叶级数表示，以结构因子 F_{hkl} 作为傅里叶系数，计算傅里叶级数的过程称为电子密度合成，又称傅里叶合成（Fourier synthesis）。电子密度函数 ρ （X，Y，Z）表示每个晶胞中分数坐标为 X、Y、Z 处的电子密度，或者是该处单位体积内的电子数。

$$\rho(X,Y,Z)=\frac{1}{V}\sum_{h=-\infty}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{l=-\infty}^{\infty}F_{hkl}\times \exp[-i2\pi(hX+kY+lZ)]$$

式中，h、k、l 为衍射指标；V 为晶胞体积。结构因子 F_{hkl} 与电子密度函数 ρ （X，Y，Z）互为傅里叶变换，即

$$F_{hkl}=\int_0^1\int_0^1\int_0^1\rho(X,Y,Z)\exp[i2\pi(hX+kY+lZ)]\cdot V\mathrm{d}X\mathrm{d}Y\mathrm{d}Z$$

电子能量损失谱 electron energy loss spectroscopy；EELS 一种研究物体微观性质的实验方法，也属于电子能谱的一种。一定能量的电子入射到固体样品表面时，电子束受到固体表面或靠近表面的原子的作用后，其一部分能量转移给固体而引起某些激发（如固体中电子在能带间或带内的跃迁，表面和体内等离子体的振荡，以及原子轨道电子的激发等），在离开固体时将具有与原先不同的能量，这时所测得的能量分布，就称为电子能量损失谱。从这个谱的形状和其峰的位置，可获得有关固体表面和体内的电子能态以及原子结构方面的一些知识。如果入射电子的能量在几十电子伏特以下，所测得的这个谱叫做低能电子能量损失谱。它只对固体的表面灵敏，因而能提供有关表面电子态、表面原子吸附态的一些信息。它可以分析包括表面吸附原子、分子的振动特性、吸附位置和状态、各种表面和体内元激发过程、固体能带结构和晶体表面的电子自由度等表面信息。它与红外吸收光谱、拉曼光谱、隧道谱和非弹性散射低能原子束技术构成了研究表面振动谱的一整套方法。一般高分辨低能电子能量损失谱可以给出表面吸附物的振动结构信息，而一般的低能电子能量损失谱可以提供表面等离子体以及电子态信息，高能电子能量损失谱可以提供原子轨道电子的特征损失信息。

电子迁移率检测器 electron mobility detector 是一种用于检测微量永久性气体的气相色谱检测器。它的工作原理是：用纯氩作为载气、放射源可用氚或 α 射线放射源，在收集极（阳极）上加脉冲电压，脉冲的持续时间略小于电子由阴极迁移到阳极的时间，即刚刚不能收集到电子流。在检测器内电子与氩分子之间是弹性碰撞，电子保持着较高的能量，当样品气体随载气进入检测器时，则因电子与样品分子之间是非弹性碰撞，从而使电子的能量降低，整体迁移率提高，在脉冲期间即可收集到电子。收集到的电子数量（即电流大小）与样品浓度有关。这种检测器适于测定微量的氢、氧、氮、一氧化碳、二氧化碳和水蒸气等，对二氧化碳的检测限为 10^{-11} g · s^{-1}，线性范围为

3×10^3。

电子枪 electron gun 阴极、控制极和阳极的总称。因为其决定电子的发射数目，并且在结构上又组成一体而被称为电子枪。控制极放置在阴极和阳极之间，依靠它比阴极更负的电位，使电子束强烈的会聚，从而大大抵消阳极板小孔的发散作用，使电子束以细束状态由阳极板小孔穿行而过。目前最常用的电子枪主要有三种类型，分别是钨灯丝热发射电子枪、六硼化镧热发射电子枪和场发射电子枪。钨灯丝电子枪价格便宜，对真空度的要求较低，但电子束的亮度低，空间分辨率也较低，目前主要用在普通的扫描电镜和透射电镜中。场发射电子枪具有高亮度、高空间分辨率的特点，但需要很高的真空，价贵，维护困难，目前主要用在高分辨率电子显微镜和高分辨率俄歇电子能谱仪中。六硼化镧电子枪的性能介于两者之间，主要用于俄歇电子能谱仪中。目前，高性能谱仪均采用场发射电子枪作为电子源。

电子枪亮度 brightness of electron gun 电子枪每单位立体角的电流密度，采用的单位为安培·厘米$^{-2}$·单位立体角$^{-1}$。亮度是衡量电子枪性能的一个重要参量，与所用电子枪的灯丝种类以及灯丝电流和发射电流有关，一般来说电子枪的灯丝电流和发射电流越大，其亮度越高。

电子舌 electronic tongue 电子舌是用于成分检测的阵列传感器，一个阵元对应一种单一的分析对象。电子舌的工作基于电化学传感或生物传感原理，其关键技术是极其灵敏的电化学液体传感器和数字化数据分析系统，也有利用石英和高分子脂质膜技术的。电子舌可用于食品口味检测，定量辨别甜、酸、苦、辣、咸等各种味道，也有用于分析果汁原料成分、污水成分、工业废水排放监控等。

电子受体 electron acceptor; EA 电子的接受体，具有得到电子的倾向。

电子束电离 ionization by electron beam 在俄歇电子能谱分析中，一般采用电子束轰击样品而引起样品中元素的电离，从而研究物质的电离现象。这种由电子束轰击元素所引起的原子电离现象称为电子束电离。其电离效率与元素的电离截面、激发电子的能量等有关，并与电子束的强度成正比，一般当电子束的能量是电离电子的4倍时，其电离效率最高。电子束电离与光电离相比，具有亮度高和细聚焦、小束斑的特点，但次级电子的背景较高，信背比较低。

电子束感生电流像法 electron current image method induced by electron beam 利用电子束感生电流效应研究半导体材料和固体电路的方法。其原理是，当一个高能电子被固体样品吸收时，将在样品中激发产生许多自由电子和相同数量的正

离子，其中一部分自由电子离开样品表面，变成次级电子，绝大部分自由电子与离子化的原子复合。对于半导体来说，复合的时间比较长，在样品中形成多余的电荷载流子。如果在这类样品的两端加上由外接直流电源建立的电位差，在外接的电路中即可检测到电流信号，此电流反映了在电子束作用下半导体导电性的变化。

电子束损伤 electron beam damage 由于电子束辐照而使样品表面所受到的损伤。如电子束打在样品上，从样品表面原子中打出轨道电子而引起电离，由此所产生的能量可以引起样品化学键的断开，因而使样品发生物理化学变化。也可以碰撞原子核，当电子束能量足够大时，能产生核位移。在表面分析中的电子束损伤主要是由于聚焦电子束的作用使表面成分发生分解从而引起化学成分的变化。在透射电子显微镜中，由于电子束很细，其电流密度很高，其热效应不仅可以引起材料的分解，也可以引起结构的变化。为了避免电子束的损伤，应该尽可能降低电子束的电压和束流密度以及辐照时间，或对样品进行液氮冷冻处理。

电子顺磁共振 electron paramagnetic resonance; EPR 磁共振的一种，专指顺磁物质的电子自旋共振。有时简称为顺磁共振。电子自旋共振观测的是未偶电子吸收微波发生能级跃迁（也即电子自旋反转）的现象。电子顺磁共振的研究对象是具有未偶电子的顺磁物质，如自由基、过渡金属离子、晶体中的缺陷、多重态分子、碱金属的自由电子、半导体中的杂质等；样品可以是固体、液体或气体；可以进行定性或定量分析。通过解析电子顺磁共振谱可以得到物质结构及电子能级等方面的重要信息。例如，对于含有顺磁性离子的离子晶体，通过顺磁共振谱的精细结构可得到有关晶体内电场及离子能级等的信息。对于自由基，由超精细结构可得到未偶电子位置、离域程度等有关分子结构及共价键的信息。由线宽及弛豫时间还可得到物质内部相互作用的其他信息。

电子探针 electronprobe 又叫电子探针 X 射线显微分析仪。是一种微区化学成分分析仪器。它的工作原理是：用高能电子束轰击样品的某一微区（微米级），使之激发产生特征 X 射线，然后用能量色散谱仪（能谱仪）或波长色散谱仪（波谱仪）接收和分析这些不同能量的特征 X 射线，即可测出微区中元素的种类和含量，其测定范围为 5 号元素硼到 92 号元素铀。

电子探针显微分析 electron probe microanalysis 利用聚焦的高能电子束来轰击固体表面，使被轰击区的元素激发出特征 X 射线，按其波长及强度进行定性或定量分析的一种仪器分析方法。主要用来分析固体表面微区的化学成分，可分析原子序数从 3 到 92 号之间的所有元素。是一种微

区分析技术，其分析面积小至 1μm²。此外，利用电子束轰击试样所产生的其他信息还可进行形貌观察和结构分析等。电子探针显微分析广泛用于地质、冶金、材料研究等部门。该方法基本属于一种微区体相分析手段。

电子逃逸深度 electron escape depth 是指垂直于表面的一个特定距离（nm）。在此处，电子因非弹性散射过程而引起明显能量损失，其逃逸几率下降到原来的 1/e（36.8%）。电子逃逸深度是衡量电子能谱的表面性的一个重要指标。一般电子逃逸深度不仅与材料的性质有关，还与逃逸电子的能量有关。在一般的 X 射线光电子能谱以及俄歇电子能谱分析中由于其能量介于 50～2000eV 之间，其电子逃逸深度一般在 1～3nm 左右。对于金属材料其电子逃逸深度相对较小，而有机材料的电子逃逸深度较大。

电子通道图 electron channel image 也叫电子通道花样。对于比较完整的晶体试样，当入射电子束相对于试样入射角的连续变化足够大时，常可以看到一些规则分布的线或带衬度所构成的花样叠加在一般的扫描电子像上。这种花纹即为电子通道花样，是一种相当弱的衍射效应。电子花样的几何特征能充分反映晶体结构的对称性和特征。它出现的条件是：晶体比较完整以及电子束的扫描角范围大于布拉格角。

电子通道效应 electron channel effect 电子异常进入晶体的衬度效应。是指入射电子束被晶体散射的几率同它相对于晶面的入射角有关的一种效应，即入射电子束在入射角大于布拉格角的入射方向下，电子被背散射的几率较小，相应的电子进入晶体的几率较大，这些入射方向即属于通道。

电子透镜 electron lens 用电场或磁场对电（离）子起聚焦和成像等透镜作用的装置。其原理与几何光学中的透镜相似，基本可分磁透镜和静电透镜两种类型，其性能可用和光学透镜相类似的参数（如焦距等）来描述。

电子吸收光谱 electronic absorption spectrum 吸收光谱（吸光度-波长曲线）是物质分子对不同波长（能量）的光具有选择性吸收性质的表现，导致分子中的电子能级跃迁的吸收光谱称电子吸收光谱。由于分子电子能级跃迁的同时总是伴随着振动和转动状态的改变，因此，电子吸收光谱又称电子-振动-转动光谱，即分子的电子吸收光谱由转动光谱、振动光谱和电子光谱等三部分所组成。电子能级跃迁的始态和终态的能量差较大（1.5～8.0eV），光谱出现在紫外-可见区。与之对应，由于分子振动跃迁（vibrational transition）必然伴随着转动跃迁（rotational transition），故振动光谱又称振动-转动光谱，振动谱带由许多转动谱带所组成。分子振动能级跃迁始态和终态的能量差（0.05～1.2eV）大于纯转动跃迁的能量差，光谱出现在红外区；而在纯

转动跃迁的情况下，能量变化很小（0.00025～0.01eV），相应光谱在远红外区。

电子衍射 electron diffraction 当电子束照射到晶体上时就会出现与波类似的衍射现象，只有在满足布拉格定律方向上的电子束散射有相互加强的衍射束出射。1927年分别由美国物理学家C. J. Davisson和Germer在美国和英国物理学家George Paget Thomson在英国独立发现该现象。此现象表明电子具有波动性，而且从衍射图样确定的波长与de Broglie关系式用入射电子的动量计算出的波长相符，证实了德布罗依物质波假设的正确性。由于电子衍射图样与引起衍射的物质结构有关，所以它是研究物质结构的有效方法。但因电子束与物质中电子的相互作用较强，通常只用于研究包含少量原子的体系，如薄膜、表面、气体以及小的样品等。

电子与电子的偶极-偶极（精细）相互作用 electron dipole-electron dipole interaction 电子与电子的偶极-偶极相互作用是产生零场分裂的主要原因之一，其机理类似于电子与核的偶极-偶极相互作用。不同的是电子自旋磁矩比核自旋磁矩大1836倍，因此电子自旋磁矩间的偶极-偶极相互作用也要强1000倍以上，由它所产生的谱线分裂间隔（称之为精细结构以示区别电子与核的超精细相互作用引起的超精细结构）就要比超精细分裂间隔大得多。

电子与核的偶极-偶极（超精细）相互作用 electron-nuclear dipole (END) interaction 各向异性超精细分裂是由电子自旋磁矩与核自旋磁矩的偶极-偶极相互作用产生的，类似于经典理论中偶极子间的相互作用的描述，其哈密顿算符形式为

$$\hat{H} = -g\beta g_n\beta_n\left\{\frac{\hat{S}\cdot\hat{I}}{r^3} - \frac{3(\hat{S}\cdot\hat{r})(\hat{I}\cdot\hat{r})}{r^5}\right\}$$

在选定实验室坐标系（xyz）后，上式可写成

$$\hat{H} = \hat{S}\cdot \boldsymbol{T}\cdot\hat{I}$$

式中，$\boldsymbol{T}$就是各向异性超精细耦合张量，其张量元为

$$T_{ij} = -g\beta g_n\beta_n\left(\frac{r^2\delta_{ij} - 3ij}{r^5}\right)$$

$$(i,\ j = x、y、z)$$

显而易见，$\boldsymbol{T}$是个无迹张量。电子与核的偶极-偶极各向异性相互作用项在溶液中由于分子的快速滚动而被平均掉，因而观测不到。

电子跃迁 electronic transition 分子因吸收外部能量（光、热、电和化学能等）价电子从低能级向高能级的跃迁，跃迁始态和终态的能量差约在1.5～8.0eV，对应的光谱在紫外-可见区。由于电子能级跃迁所需的能量较大，因此，电子能级跃迁的同时总是伴随着分子振动和转动状态的改变，即分子的电子跃迁同时包含着分子的振动跃迁和转动跃迁。

电子自旋共振 electron spin reso-

nance；ESR 是有关电子的自旋共振的总称。根据样品的磁性可分为电子顺磁共振、铁磁共振、反铁磁共振、亚铁磁共振等。在一般没有特殊说明的情况下，电子自旋共振多指的是电子顺磁共振。

电子自旋共振成像 electron spin resonance imaging 通常的 ESR 测试中，谐振腔内的样品均处在相同的扫描磁场，所得到的 ESR 谱是样品中所有自旋浓度的贡献，失去了自旋位置的信息。电子自旋共振成像检测的是电子自旋浓度在空间的分布。实现电子自旋共振成像的关键是在原有的外磁场上再叠加上一个线性梯度场，常用的方法是增加一个梯度场线圈。实验得到的数据还要再经过适当的数学处理，就可变换为一维、二维或三维空间的自旋浓度成像图。自旋浓度的空间分辨率由梯度场确定，磁场梯度越大，空间分辨率就越高。电子自旋共振成像，特别是 L 波段或更低频的电子自旋共振成像，可用于研究动植物活体、生物组织、各种材料内的顺磁物种分布及动态行为等，在生物科学、医学、材料科学、催化、表面科学等众多领域有重要应用。

电子自旋共振氧定量法 electron spin resonance oxidimetry 利用 ESR 测定氧气含量的方法。因氧分子是三重态顺磁分子，可造成自由基的猝灭或其 ESR 峰的增宽，所以通过测定与无氧条件下相比自由基的 ESR 强度的减弱或峰宽的增大，即可推测溶液或生物组织中的氧含量。一般常采用氮氧自由基作为探针进行氧含量测定。

电子自旋轨道角动量 electronic spin angular momentum 电子自旋运动产生的动量矩，以 S 表示。它的绝对值由电子自旋量子数 s 决定

$$|S| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

s 只取 $\frac{1}{2}$ 一个值。因此电子存在着两种自旋态 $S = \frac{\pm\sqrt{3}}{2\hbar}$

电子自旋回波 electron spin echo 在静磁场 H_0 中由许多未偶电子的自旋磁矩合成的总磁矩矢量 M（宏观磁化强度）位于平行 H_0（沿 z 轴）的方向上。在垂直于 H_0 的方向上（设沿旋转坐标系的 x' 轴）施加 $90° - \tau - 180°$ 的脉冲序列，$90°$ 脉冲终止时，M 转至 y' 轴方向。在此之后的 τ 时间内，由于样品所处的静磁场 H_0 有一定的不均匀性，将使各增量磁矩（在 $x' - y'$ 平面上）绕 z 轴进动的频率有所差异，从而导致增量磁矩失去相位相干，展成扇形。τ 时间后，再加上 $180°$ 脉冲，结果各个增量磁矩将绕 x' 轴转至 $-y'$ 轴方向。此后各增量磁矩以原来的频率按原有的方向继续在 $x' - y'$ 平面上绕 z 轴转动，扇形逐渐减小，正好经过 τ 时间后，各增量磁矩重新聚集于 $-y'$ 轴方向上，形成扇形闭合。上述过程是恢复相位相干的过程，到时间 $t = 2\tau$ 时将呈现出信号的最大值，

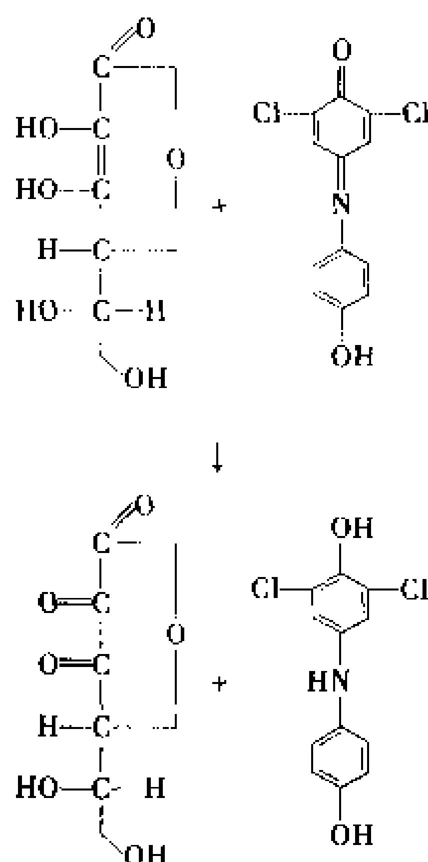
这就是电子自旋回波。用电子自旋回波法可以消除由于样品各处局部磁场不均匀而引起的谱线增宽的影响，可不受不均匀磁场的影响而测量横向弛豫时间 T_2。

电子自旋回波包络线调制 electron spin echo envelope modulation; ESEEM 用双脉冲（90° - τ - 180° - τ - 回波）或三脉冲序列（90° - τ - 90° - τ' - 90° - τ - 回波）测定电子自旋回波，观察回波强度随 τ（双脉冲）或 τ'（三脉冲，固定 τ）值的变化，可发现随时间变化的强度曲线很多情况下并不是光滑的指数衰减曲线，而是回波强度带有周期性的增减，即回波强度受到某些调制，这就是电子自旋回波包络线调制。产生这种调制的原因是在电子自旋附近存在一些磁性核。解析 ESEEM 谱可以得到 ESR 谱无法得到的弱的超精细耦合常数、核四极矩耦合常数等 ESR 参数，可以推测电子自旋附近的磁性核的个数、距离、方位等结构信息。还可以由双脉冲和三脉冲 ESEEM 谱分别计算横向和纵向弛豫时间。

电子自旋回波电子-核双共振 electron spin echo-electron nuclear double resonance; ESE-ENDOR 它的基本原理是利用微波脉冲序列 $\left(\frac{\pi}{2}-\tau-\frac{\pi}{2}-T-\frac{\pi}{2}-\tau-\text{回波}\right)$ 产生电子自旋回波，在第二和第三脉冲之间留足够时间 T 施加射频脉冲。因一部分核吸收射频脉冲发生共振，与这些核相结合（受核调制）的电子自旋将受到影响，其进动频率发生变化，在第三个微波脉冲后，这部分电子自旋将不能重聚形成回波，实际观测到的回波将减弱。所以通过扫描射频频率，观测自旋回波的减少，就可得到 ENDOR 谱。与通常的 ENDOR 相比，ESE-ENDOR 在观测回波时不存在射频场，所以不受射频场噪音的影响，具有较高的检测灵敏度；另外因使用快速脉冲技术，适合检测短寿命的顺磁物种。

淀粉测定 determination of amylum 淀粉分直链淀粉和支链淀粉。直链淀粉在溶液中与碘形成络合物而显蓝色，该络合物的最大吸收波长为 620～650nm；而支链淀粉与碘的结合能力很弱，它与碘络合生成紫红色的络合物，其最大吸收波长为 550nm。利用直链淀粉和支链淀粉不同的“碘结合能力”，采用紫外分光光度法可以测定淀粉中直链淀粉的含量。此方法称碘蓝比色法，是一种测定直链淀粉的国际标准分析方法。直链淀粉和支链淀粉的含量还可用近红外光谱法测定。

靛酚滴定法 indophenol titration method 一种测量维生素 C 含量的方法。样品经草酸溶液匀浆提取后，在酸性介质中，用 2,6-二氯靛酚标准溶液滴定样品提取液，粉红色的 2,6-二氯靛酚被抗坏血酸还原而褪色，以粉红色作为滴定终点，扣除空白值，可得还原型抗坏血酸的含量，但 Fe^{2+}、Cu^{2+}、Sn^{2+} 等杂质会使结果偏高。反应式如下



靛酚蓝比色法 indophenol blue colorimetry 一种测定铵态氮的方法。样品经消化处理后，在碱性条件和亚硝酰铁氰化钠作用下，与次氯酸盐和苯酚反应生成水溶性染料靛酚蓝，EDTA 为掩蔽剂，在 625nm 进行比色分析。

凋萎含水量 wilting water percentage 又称凋萎系数。是指作物开始永久凋萎时土壤的含水量，是土壤中作物能利用的水分的下限，一般以田间持水量和凋萎系数之间的水分为有效水。凋萎系数的大小与土壤质地、土壤中盐分浓度和作物种类有关，是重要的土壤水分常数之一。一般主要采用生物法，即在容器中栽培作物，当作物因缺水而开始永久凋萎时，测定其土壤含水量，即得凋萎系数。另一法为由土壤最大吸湿水乘上一系数后间接求得。

叠加内标法 added internal standard method 又称内加法。是色谱分析中的一种定量方法。它是在样品混合物中加入已知量的被测组分的标样（叠加内标物），目的是使这一组分的峰高或峰面积有所增加，在完全相同的色谱条件下分别对未加标样和加入了标样的样品进行测定，比较二者被测组分的峰高或峰面积，按下式计算被测组分的含量。

$$P_i\% = \frac{A_1}{A_2 - A_1} \cdot \frac{W_s}{W}$$

式中，P_i 为组分 i 的百分含量；A_1 是组分 i 的峰面积；A_2 是组分 i 加标样后的峰面积；W_s 为叠加内标物质量；W 为未加标样的样品质量。

丁达尔现象 Tyndall phenomena 当一束光通过不均匀的介质（如乳状液、悬浮液、胶体溶液）时，由于这种介质中通常含有大的质点，它们的折射率与周围均匀介质的折射率不同，产生光的散射，从溶液的侧面观察时，会看到颗粒散射出来的光，即一道清晰的光径，这种现象就称为丁达尔现象。

顶电流 apex current 在测量非法拉第导纳或在张力法中，当一个非电活性物质在指示电极表面吸附或解吸时，交流电流对外加电位的作图呈现极小或极大。这个极大或极小称为顶，以强调它的非法拉第性质。顶上最大的电流值称为顶电流。

顶空气相色谱法 headspace gas

chromatography；GC-HS 是一种对液体或固体样品中所含挥发性成分进行气相色谱分析的间接测定方法。将被分析样品放在一个密闭容器中（通常为可密封的小玻璃瓶），在一恒定的温度下达到热力学平衡，以样品容器上部空间（顶空）的蒸气作为样品进行色谱分析。当样品瓶中样品上方的蒸气压相当低时，色谱峰面积 A_i 的大小与样品中挥发性组分的蒸气压 P_i 成正比，$A_i = C_iP_i$，式中 C_i 是校正因子。在真实体系中，蒸气分压可表示为 $P_i = P_{0i}\chi_i\gamma_i$，$P_{0i}$ 为组分 i 的饱和蒸气压，χ_i 是组分 i 的摩尔分数，γ_i 是组分 i 的活度系数。

顶替法 displacement development 又称取代扩展法。它是将样品混合物加入色谱柱后，在惰性流动相中加入与固定相的作用能力比样品中所有组分都强的物质作为顶替剂，或直接用顶替剂作流动相，当流动相通过色谱柱时，样品中各组分即依据吸附或溶解能力的强弱顺序由固定相上被顶替出来，作用力最弱的组分最先流出色谱柱，最强的组分最后流出，其流出曲线的台阶形随组分的含量变化。此法可用于制备纯物质或从混合物中浓缩分离某一组分。

顶替色谱法 displacement chromatography 又称置换或排代色谱法。参见置换色谱法条。

定额抽样 quota sampling 按照额定数目从样品总体中进行抽样。

定量差热分析 quantitative differential thermal analysis 利用差热分析原理能够得到热量和其他任一物理参数的定量结果的技术。由于所测得热量可定量地计算试样的转变热、熔融热和反应热等，因此可用于测定物质的纯度、物质的组成、高聚物的共聚组成和高聚物的结晶度等。

定量电子自旋共振 quantitative electron spin resonance 用 ESR 方法进行定量分析称为定量 ESR，主要用于确定样品中的自旋浓度或自旋数目含量。定量分析时一般需使用已知自旋浓度或总自旋含量的标准样品。如标准样品与测试样品相同时，或两者虽不相同但它们的 ESR 谱（包括峰型和峰宽等）很相似时，可通过比较峰强度进行定量。其他情况下，需进行两次积分谱数据（因 ESR 谱是一次微分谱）的比较，或利用考虑了峰强度、峰宽、微波功率、样品质量等众多因素的理论公式进行计算，得到定量结果。但无论哪种情况，因每次在谐振腔中放置样品时的样品位置的不一致性，会引起仪器设定参数及峰强度的一些变化；ESR 谱峰一般较宽导致积分数据不准等原因，用 ESR 方法进行定量分析准确度不是很高，通常有百分之几甚至更高的误差。

定量分析 quantitative analysis 分析化学的一个重要分支，其任务是测定试样中各有关组分的含量。依据测定原理可分为化学分析法和仪器分析法。化学分析法是以物质的化学反应为基础的分析法；仪器分析法是以物质的物理性质或物理化学性质为基

础，并需使用专用仪器的分析法。定量分析通常涉及取样、试样的干燥、试样的分解、干扰的消除（分离和富集）、测定和分析结果的计算、表示和检验等一系列严格的步骤。

定性分析 qualitative analysis 分析化学的一个重要分支，其任务是识别和鉴定纯物质或试样中的组分，即确定试样中的原子、无机或有机官能团、分子的种类等。有时，亦涉及鉴定含一种或多种物质的一个物相。通常在进行定量分析之前进行。依据鉴定原理可分类为化学分析法和仪器分析法；根据对象可分为无机定性分析和有机定性分析；根据鉴定的手续可分为系统分析和分部分析等。无机定性分析可使用的化学分析法有硫化物、氢氧化物、碳酸盐等系统分析法和特效试剂法，而近代多采用原子发射光谱、等离子体原子发射光谱等仪器分析方法。有机定性分析亦多采用红外光谱、核磁共振谱等仪器分析方法。

定影液 fixer solution 曝光后的感光板经显影后，只有曝光区域的部分卤化银还原为银，还有很大部分的卤化银未被还原，这部分卤化银见光后仍能被感光而变黑，破坏显影后的影像，因而需要除去这部分卤化银，固定显影所得的影像。使显影所得的影像固定下来的试液称为定影液。它包括定影剂、保护剂、中和剂和坚膜剂。

动（态弹）簧分析 dynamic spring analysis；DSA 在程序控制温度下，把高分子试样涂覆于金属弹簧上，测定弹簧伸缩振动和温度关系的一种技术。该法可得到高分子材料的力学性质，其特征是测定弹簧的拉伸振动。

动力电流 kinetic current 电极活性物质 B 能在电极上还原或氧化，但 B 是通过一个化学反应从另一物质 Y 产生，而 Y 是一非电活性的。由于 B 的还原或氧化而产生的电流，其大小就完全或部分地受那个化学反应的速率所控制，这样的电流就称动力电流。其化学反应可能是非均相的发生在电极-溶液界面，也可能是均相的发生在离电极-溶液界面有一定距离的地方。

动力学比色法 kinetic colorimetry 利用被测元素影响化学反应速度的原理进行元素定量分析的方法称为动力学化学分析法。由于被测元素常常起催化作用，故这类方法又常称催化化学分析法。在这类方法中，若用比色法（或分光光度法）测定反应速度，则称为动力学比色法（动力学分光光度法）或催化比色法（或催化分光光度法）。动力学分光光度法与一般的分光光度法相比，灵敏度更高。缺点是操作条件较严格、干扰因素较多。

动力学分光光度法 kinetic spectrophotometry 指以紫外可见分光光度计为检测手段，基于测量反应物浓度与反应速率之间的定量关系以实现试样组分定量测定的分析方法。例如，对一级反应（反应速率仅与反

应物 A 浓度的一次方成正比)，其速率方程为

$$v = -\frac{dc_A}{dt} = K_1(c_0 - c)$$

式中，K_1 称一级反应速率常数；$(c_0 - c)$ 为 t 时刻 A 物质的真实浓度；c_0 为 A 的起始浓度。为求出经 t 秒后 A 的浓度，将上式积分可得 $\ln c_0 - \ln(c_0 - c) = K't$，浓度的对数与时间呈线性关系。动力学分光光度法中一级反应应用广泛，因为只需要简单地观察反应速度，便能从速度-浓度校正曲线求得浓度。该法具有灵敏度高、选择性较好、可用于非平衡态的测定等优点，但要求测量体系的反应速度与所用仪器响应时间相适应。动力学分光光度法可分为非催化动力学分光光度法（包括速差动力学分析法）和催化动力学分光光度法（包括酶催化动力学分析法）。

动能释放 kinetic energy release; KER 指质谱分析中先驱离子（母离子）的内部能量转换为分解生成物的动能的现象。在质谱仪中产生的亚稳态离子，由于带有多余能量，可以发生亚稳离子分解（一般在 $10^{-6} \sim 10^{-5}$ s 之间），产生亚稳离子峰，可通过亚稳离子峰形及宽度探讨裂解机理。

动态 NMR dynamic NMR 利用 NMR 方法通过谱峰峰形和峰形的变化来研究许多速率过程从而获取这些过程的动力学和热力学的参数及其机理。这些速率过程是在 10^{-5}s 至更长时间内发生的事件。分子内旋转过程、分子内或分子间的化学交换过程如分子内重排，互变异构，构象互变以及流变分子等处于动态平衡过程，也可延伸到非平衡态体系中的化学反应过程，反应物产物的浓度的变化等等。

动态包覆 dynamic coating 又称动态涂渍或在位涂渍。参见**动态涂渍**条。

动态顶空分析法 dynamic headspace analysis 也称吹扫-捕集（purge-trapping）分析法，该方法是用惰性气体通入液体样品（或固体表面），把要分析的组分吹扫出来，使之通过一个盛有吸附剂的容器进行富集，然后再把吸附剂加热，使被吸附的组分脱附，用载气带入气相色谱柱中进行分析。动态顶空分析法有富集的功能，对痕量组分的分析比较有利。存在的问题是，所用时间较多，吹扫中有可能引入杂质以及如何选择吸附剂等。

动态二次离子质谱 dynamic secondary ion mass spectrometry 在分析时，初级离子流密度和剂量能够剥离大于一个单原子层材料的二次离子质谱分析。由于其离子的剥离速度快，分析的结果是一个连续剥离过程中的成分，即动态成分。与静态二次离子质谱相比，其深度分析能力很强，但很难给出表面的信息，适合于成分的深度分析。

动态二次离子质谱法 dynamic secondary ion mass spectrometry 二次离子质谱法的一种。它使用的一次粒子束的能量比较大，约为 $10^3 \sim 10^4$eV，束斑可达微米量级，离子流密度可达

$mA \cdot cm^{-2}$,因此对固体表面的刻蚀速度很快,主要用于样品表面及中深层的成分分析。

动态分离 dynamic separation 类似于色谱中的梯度淋洗,动态调节毛细管中背景电解质的组成(或浓度、pH值等),使其在毛细管电泳分离中形成梯度变化,或局部基质动态变化,即在非稳态介质中和非均匀电场中进行毛细管区带电泳分离。

动态复合离子交换模型 dynamic complex ion exchange model 离子对色谱保留机理的一种理论模型。该模型认为流动相中形成的离子对化合物与吸附在固定相表面的离子对试剂形成亚稳态复合物,这一亚稳态复合物又在固定相表面分解成非复合的离子对。

动态改性 dynamic modification 又称动态脱活。是一种相对于管壁涂渍或键合而言的脱活方法。最常用的动态改性方法是在运行的缓冲液中加入适当的添加剂,如各种不同的亲水聚合物和各种表面活性剂。

动态光散射 dynamic light scattering 在散射成分中含有丰富的频率位移信息,其频率位移最小的中心部分称为准弹性光散射。同时由于多普勒频移直接和散射粒子热运动有关,所以测定准弹性光散射的频谱,就可以了解散射粒子的动态性质。随着激光技术和计算机技术的发展和应用,使直接测量散射光电场强度的自相关函数成为可能,从而可以使用光散射法观测散射粒子的动态性质(即动态光散射)。通过准弹性光散射的测量,可以方便地求出溶质分子或粒子的扩散系数、流体力学半径等动力学参数,因此动态光散射是研究高聚物溶液及胶体和粗分散体系的一种有效方法。参见**准弹性光散射**条。

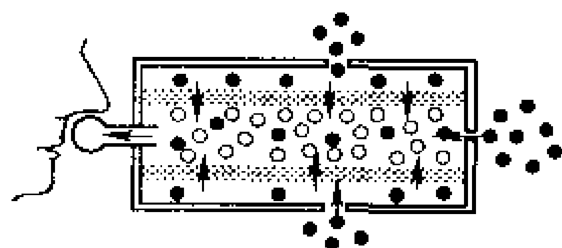
动态红外光谱法 dynamic infrared spectroscopy 很多样品体系随时间而变化,当需研究样品状态随时间变化的现象时,需应用动态红外光谱技术。利用FTIR光谱仪进行动态红外测定,根据体系随时间变化的快慢大致分三种情况。第一种是假稳定过程,体系变化较慢(如约10min以后才感觉得到变化)。对于较慢的化学反应,能在反应开始时记录下起始反应物的光谱,在整个反应过程中可多次记录经过一定间隔时间后的反应混合物的光谱,从而能观察到整个反应随时间变化的情况。第二种是快变化过程,时间分辨率在秒的数量级($1s<t<600s$),利用FTIR采集数据软件,可连续快速地监测光谱。最快的采集速度只取决于磁盘存取的时间或干涉仪扫描的速度。第三类是非常快的过程,此时,其组成变化或瞬变寿命的时间短于光谱仪的一次扫描时间,这种瞬态光谱可用时间分辨光谱技术来测定。

动态溅射 dynamic sputtering 在空心阴极灯内加在电极间的电压使惰性填充气产生正离子,并向阴极加速,以足够的能量撞击阴极,把阴极材料元素转变成气态原子,这一过程叫动态溅射。被溅射出来的气态原子,从

两极间的电压，和与填充气离子间的碰撞中获得足够大的能量被激发到较高电子能级态，当其回复到较低能级时，受激原子发射特征辐射光谱。

动态离子交换模型 dynamic ion exchange model 离子对色谱保留机理的一种理论模型。该模型认为离子对试剂中的疏水性反离子首先吸附到固定相表面，形成以该反离子为功能基的动态离子交换表面，即原本为非极性的固定相表面变成了离子交换剂。然后，溶质离子与以该反离子为功能基的动态离子交换剂作用达到保留和分离。

动态气味测量仪 dynamic measuring instrument of order 恶臭的官能实验方法之一，以臭气浓度或臭气指数表示。气味计是一个 12.7cm × 15.2cm × 6.4cm 的箱状装置，见下图。在其上部和下部有两层活性炭，在两层之间具有通过臭气的空间。在臭气通过的空间的左右侧面一面有人的鼻子接触用的吸入口，另一面有现场环境臭气通过孔（该孔的孔径有4～7种，以便于选择适当的稀释比）。此外，位于上、下部的活性炭层的外侧有直径为 1.27cm 的孔，其中通过的臭气在活



气味剂法示意图

性炭的作用下，变成无臭的空气，当嗅辨人员靠近吸气口吸气时，无臭空气和有臭空气相混合，通过对侧面开孔孔径的适当选择，来选择稀释比。

动态热机械法 dynamic thermomechanometry；DMA 在程序控制温度下，测量物质在振动负荷下的动态模量和阻尼与温度的关系的一种技术。DMA 可用于测量材料变形时所存储和消耗的机械能。新型的 DMA 仪都配有微处理机，可在 -150～500℃和宽频率范围内直接给出所测材料的弹性模量和阻尼值。因此，在研究和控制高聚物力学性能中，DMA 是最有用的工具之一。

动态涂渍 dynamic coating 又称在位涂渍或动态包覆。是在流动相中加入能起固定相作用的功能分子（改性剂），使其在载体填料和流动相间达到动态平衡，并形成功能层的一种固定相制备技术。

动态涂渍法 dynamic coated method 一种用于涂渍毛细管固定液的一种操作方法。根据要求的液膜厚度配制一定浓度的固定液溶液（50～200g · L^{-1}），然后用 N_2 以大约1cm · s^{-1}的速度将上述溶液均匀地压入毛细管柱的 1/3 左右，再以相同的速度将柱内的固定液液柱推出色谱柱，继续通 N_2 吹 4h。

动态脱活 dynamic de-activity 见**动态改性条**。

毒菜分析 toxic vegetables analysis 蔬菜中毒主要是由于甲胺磷农药残留引起的。甲胺磷农药具有毒性大、药

效高的特点，我国已明文禁止其作为蔬菜杀虫剂使用。为保证检验的准确和高效，毒菜分析分为农药残留物快速分析和色谱确证定量分析两个步骤。首先用农药残留物快速分析法对蔬菜上的农药残留情况进行判断，筛选后的样品再做进一步的色谱确证定量分析。用气相色谱、液相色谱和气-质联用仪可对蔬菜上的农药残留物做定性定量测定。

毒力 toxicity 衡量药剂对有害生物毒性作用大小的指标之一，表征药剂对有害生物所具有的内在致死能力。药剂对非靶标生物的毒杀能力通常称为毒性。药剂对试验昆虫等动物的致死作用经常用致死中量（LD_{50}）或致死中浓度（LC_{50}）表示；对其他生物体如真菌、细菌或植物体的药效反应大小用有效中量（ED_{50}）或有效中浓度（EC_{50}）表示；药剂对昆虫等动物的快速击倒作用常用击倒中量（KD_{50}）或击倒中时（KT_{50}）表示。

读脉冲及相位 read pulse and phase 见相位循环条。

端窗式X射线管 end-window X-ray tube X射线发射窗口位于X射线管的端部，垂直于管轴方向，是多道X射线荧光光谱仪中经常采用的X射线管。这种X射线管产生的X射线对试样的辐照比较均匀，当试样安放在垂直于X射线管轴的位置时，有利于减小从光源到样品之间的距离，安排较多的分光、检测通道。

端粒酶 telomerase 是一种核糖蛋白酶，由RNA和蛋白质构成，它能在端粒DNA的一条链上以添加特殊的碱基的形式而形成许多重复单位，维持端区的稳定和活力。

短波限 short wavelength limit 在指定管电压下操作的X射线管，发射X射线光子的上限能量或是最短波长。在X射线管中，自灯丝发射的电子被管电压所加速，以高速撞击阳极靶面时，如果电子在一次碰撞中速度就降为零，就能产生波长为短波限的X射线光子。短波限$\lambda_{最短}$和管电压V的关系为：$\lambda_{最短}=1239.8/V$，式中，波长的单位为nm；电压的单位为V。

短柱色谱法 short column chromatography 使用比通常柱长短的色谱柱进行分离或制备的色谱方法。在相同色谱条件下，色谱柱越短分离效率则越低，但分离速度加快，适合组成简单的样品的快速分离或某个目标化合物的制备与纯化。

断裂 cleavage 指化学键的断裂。具有奇电子数的分子离子或其他离子，可按均裂（homolytic cleavage）或异裂（heterolytic cleavage）过程分解，转移一个电子则发生均裂，用单鱼钩箭头表示，转移一对电子则发生异裂，用双鱼钩箭头表示。

断续电弧 interrupted arc 电弧光源是发射光谱分析常用的激发光源之一。普通电弧光源的电极温度较高，不适宜于低熔点物质的分析，为了降低电极的温度，可以采用断续弧光。若将直流或交流电弧接上适当的控制线路，使电弧时断时续，则成为断续电弧。断续电弧的性能，可用断续比和

断续频率两个参数描述。燃弧时间和熄弧时间的比值，称为断续比。每分钟电弧断续次数，称为断续频率。断续电弧的控制方式，有机械控制和电子控制两种。断续电弧与连续交流电弧不同，它的断续性能不受电源电流振荡周期的限制，可以根据实际需要随意改变。断续电弧适用于低熔点试样的光谱分析，有较低的检测限。

断续效应 intermittency effect 又称断续照明效应。两个相等的照度（或光强度），对同一感光板曝光，一个是连续曝光，另一个为断续曝光，总的曝光时间和连续曝光的时间相等，但两者产生的黑度并不相等，这种现象称为断续照明效应。断续照明效应对乳剂的灵敏度和反衬度均有影响，对灵敏度的影响没有一定规律，一般由实验确定，断续照明的反衬度一般比连续照明的反衬度大。

堆积硅珠 stacked silica bead 由毫微米粒径的二氧化硅微粒凝集而成的硅胶微珠。微珠粒径小（5～10μm），具有全多孔结构，但又不存在全多孔硅胶那样的深孔，传质阻力小，是高速和高效的液相色谱填料。

堆积性能 bulk property 是表征载体在色谱柱中填充的均匀性和密实性能的一个参数。它直接影响着色谱柱的分离效能和重现性。填充的均匀性和密实性，也即堆积性能与载体颗粒的形状、大小及其均匀性有关，还与载体的机械强度有关。对于聚苯乙烯或葡聚糖凝胶等类型的载体，其堆积性能还与在特定溶剂中的溶胀率或热胀率有关。颗粒度越小，填充均匀性越差，这时必须选用筛分范围极窄的载体（例如高效液相色谱）。

对比度 contrast 吸光光度法中不仅要求所选显色反应灵敏度高、选择性好，生成的有色物质组成恒定、化学稳定性相对较好，还要求生成的有色物质的颜色与过量显色剂的颜色有明显的差异，故将有色物质的最大吸收波长（λ_{max}^{P}）与显色剂的最大吸收波长（λ_{max}^{R}）之差称为对比度，即 $\Delta\lambda_{max}=|\lambda_{max}^{P}-\lambda_{max}^{R}|$。显然，$\Delta\lambda_{max}$愈大，表示反应产物与显色剂的吸收光谱的重叠度愈小，由过量显色剂引起的测量误差愈小，分析操作愈简便。通常 $\Delta\lambda_{max}>80$nm 属高对比度。

对称中心 inversion center 又称倒反中心。进行倒反对称操作的对称元素，国际符号为 $\bar{1}$。设有一个几何点，作通过该点的任意直线，在直线上距离该点等距离的两端可以找到性质完全相同的两个对称等效点，该几何点就是对称中心。空间中任意一点向对称中心作直线并延伸等距离的操作就是倒反操作。

对电极 counter electrode 又称辅助电极。与自电极或支持电极组成一对的另一电极。对电极中不应包含分析元素。

对角矩阵最小二乘修正 diagonal least-squares refinement 晶体结构测定中，一种优化结构模型的最小二乘计算方法。此法假定所有的晶体结构参数（包括原子的坐标参数和

热振动参数）相互之间是无关的，可以逐个、独立地确定每个结构参数的最佳值。其优点是可以大大地节省计算机内、外存空间和计算时间，缺点是所得的结果比较粗糙，所以往往在晶体结构很大（即结构参数很多）时或在结构修正的初始阶段中使用。

对角线峰　diagonal peaks　二维NMR谱中 $F_1(\omega_1)$、$F_2(\omega_2)$ 域，相同的坐标及其相同的范围表示的正方形图，其中以两域值皆相等（$\omega_1=\omega_2$）的点的对角线上出现的谱峰为对角线峰，又称自动相关峰（auto correlated peaks）或自峰（auto peaks）。三维谱中则有 F_1、F_2、F_3 域，凡空间点 $\omega_1=\omega_2=\omega_3$ 连线处出的峰为对角线峰，简称对角峰。

对流传质　mass-transfer by convection　物质的粒子随着流动的液体而移动。引起对流的原因有外加搅拌（强制对流），或液体各部分间由于浓度差或温度差所产生的密度差（自然对流）。

对数生长期　logarithmic phase　细胞群中的细胞数的对数随时间呈直线增加的时期。通常该时期的细胞去代谢活性维持于稳定状态，以一定的细胞周期反复进行分裂。

对数正态分布　logarithnic normal distribution　若一组测量值经过对数变换，将测量值转换为对数值后遵从正态分布，则称其遵循对数正态分布。对数正态随机变量 x 的概率密度函数为

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sigma_{\lg x}\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(\lg x-\mu_{\lg x})^2}{\sigma_{\lg x}^2}\right]$$

式中，$\mu_{\lg x}$ 与 $\sigma_{\lg x}^2$ 分别为变量 x 取对数后 $\lg x$ 的平均值与方差。在分析测试中，特别是在痕量分析中，在不少情况下，测定值不遵循正态分布，而是遵循对数正态分布。

对映异位与非对映异位　enantiotopic and diastereotopic　见**手性基团**条。

对照试验　contrast test　分析实验中，常用已知溶液代替试液，用相同的方法进行鉴定，进行比较，以检查所用试剂是否失效或反应条件等控制是否正确，称为对照试验。该方法亦是检验系统误差的有效方法。

钝化　passivation　由于金属表面上腐蚀产物的生成而出现的腐蚀速度降低的现象。

钝化剂　passivator　导致钝化状态的化学试剂。

多巴胺　dopamine；DA　DA 与去甲肾上腺素合成基本相似，是多巴经多巴脱羧酶作用脱羧后生成，它是去甲肾上腺素和肾上腺素的前体物，是儿茶酚胺成员之一。

多波长分光光度法　multi-wavelengths spectrophotometry　泛指采用多个测量波长进行测定的分光光度法。传统的分光光度法一般采用单波长完成对一种组分的测定。单波长分光光度法存在不能测量不透明的试样；样品池和参比池之间，样品溶液和参比溶液之间的不一致性会导致对小吸光度测定产生较大误差等缺点，

更难应用于较复杂的体系。采用多波长测定可以较全面地获得分析体系的测量数据，倘若再结合合适的化学计量学方法对测量数据进行解析，便可获得复杂多组分体系的定量及定性方面的信息。多波长的选择可分为全波谱(full spectra)和非全波谱两种情况，前者通常等步长地选择测量波长，测量点数可达数百个、甚至更多，这种方法由于测量点分布于整个波谱区，因此能全面获取分析体系的信息，目前一般均采用这种方法；后者通常要凭经验或通过某些计算程序有选择地确定一些测量波长，可减少计算量，但易丢失信息，手续也较繁琐，目前已很少采用。广义而言，凡采用3个以上测量波长的分光光度方法均可称为多波长分光光度法。

多残留分析 multi-residue analysis 对待测样品中多种农药残留同时进行定性、定量分析。参见**农药残留分析**条。

多重比较 multiple comparison 在多因素水平试验中多个平均值之间的显著性检验，是 t 检验的推广。在多因素水平试验中 F 检验确定因素效应是显著性的，并不说明任何两因素水平效应之间均有显著性差异，要确定哪些因素水平效应之间有显著性差异，需对反映各因素水平效应的平均值进行多重比较。多重比较所用的统计量

$$d_T = q_{\alpha(m,f)}\sqrt{\frac{S_E^2}{n}}$$

式中，m 是因素水平数；n 是得到每个平均值的重复测定次数；$f=m(n-1)$ 是计算试验误差 S_E^2 的自由度；$q_{\alpha(m,f)}$ 是在显著性水平 α 时的置信系数，可由统计手册中查到。d_T 是在显著性水平 α 时随机效应所产生最大差值，当任何两平均值之差 $\Delta\bar{x}$ 大于 d_T，表示该两因素水平变化的效应是显著的。

多重解法 multiple solution method 晶体结构测定中破解相角问题的一种直接法。多重解法是符号附加法的改进，主要基于数值计算比符号推导更有利于发挥计算机的潜力。此法以各种可能的相角值代替了起始套中未知相角的符号，并组合成多种不同的起始套，由此出发可以推导出大量不同的结果，形成庞大而复杂的树形结构。由英国的乌尔福逊(M. M. Woolfson)等人开发的多重解法计算程序 MULTAN 就是这种方法的全自动计算程序的代表，在20世纪80年代曾流行一时，MULTAN 几乎成了直接法的代名词。

多重裂分 multiple splitting 因光电发射产生的未配对电子与原子中其他未配对电子的相互作用引起光电子谱线的分裂，也称静电裂分。主要在开壳层（顺磁）分子和离子中产生，内层电子的电离过程至少产生两种离子状态。其能量差别是由于剩余的内层电子与未成对价电子间的交换作用。

多重态 multiplet 当原子和分子中含有 n 个（$n=0, 1, 2, \cdots$）未偶电子时，其自旋多重度（multiplic-

ity）为 $2ns+1=n+1\left(s=\frac{1}{2}\right)$，即具有 $n+1$ 重态。绝大多数的分子不具有未偶电子，因此为单重态；氧分子的基态是三重态；锰（Ⅱ）离子（有5个未偶电子）的基态是六重态。

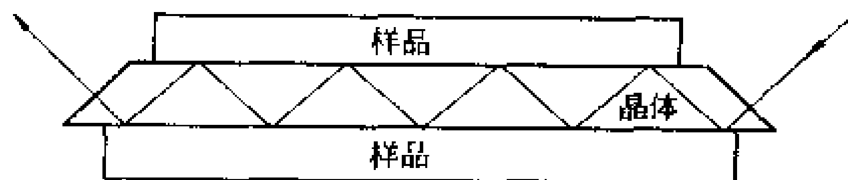
多重线 multiplet 一组特征的X射线荧光光谱线，产生于始态能级具有共同的主量子数 n 和角量子数 l、而自旋方向只能相反的谱线。在图表线中，例如M系，存在着这种谱线；而伴线则大多数是由多重线组成的。

多重性 multiplicity 描述分子中电子自旋状态的术语。当分子中占据同一分子轨道的电子自旋都“配对”，即自旋方向相反时，其电子运动的总自旋 $(2\Sigma+1)=1$，称分子处于单重态（singlet state），基态分子通常都为单重态；若分子中电子不配对，即有相同的自旋方向，称分子处于三重态（triplet state），其电子运动的总自旋 $(2\Sigma+1)=3$。单重态和三重态统称为分子的多重性。

多重性因子 multiplicity factor 在记录衍射强度的实验装置中，同一衍射角处能产生衍射的总数。例如：在收集多晶衍射数据时，根据布拉格公式，只要点阵面间距相同，产生衍射的衍射角也相同，此时在该衍射角处测得的衍射强度是各个衍射的强度之和。产生相互重叠的衍射的阵面族有两种不同的类型，一种是对称等效的阵面族，它们不但点阵面间距相同，衍射的强度也相同。另一种是点阵面间距相同的非等效阵面族，这时它们的衍射强度一般并不相等。

多次反射池 multi-reflect pool 一种可使入射光线在其内进行多次反射的毛细管。该毛细管外壁镀一层高反射银膜，再覆盖一层保护层防止银膜脱落。入射光从毛细管入口端一侧照射毛细管，光在毛细管内进行多次反射，从出口端一侧射出。

多次内反射附件 multiple internal reflectance accessories; MIR 一种记录衰减全反射（ATR）光谱的装置。如下图，样品放置于折射率较高的ATR晶体两边，光线进入晶体内，在其中经多次内反射，每次反射时都要穿透样品一定深度，被选择性衰减。经多次内反射后ATR光谱获得的对比度更好，使较弱的吸收峰也能显示出来。参见**衰减全反射**条。



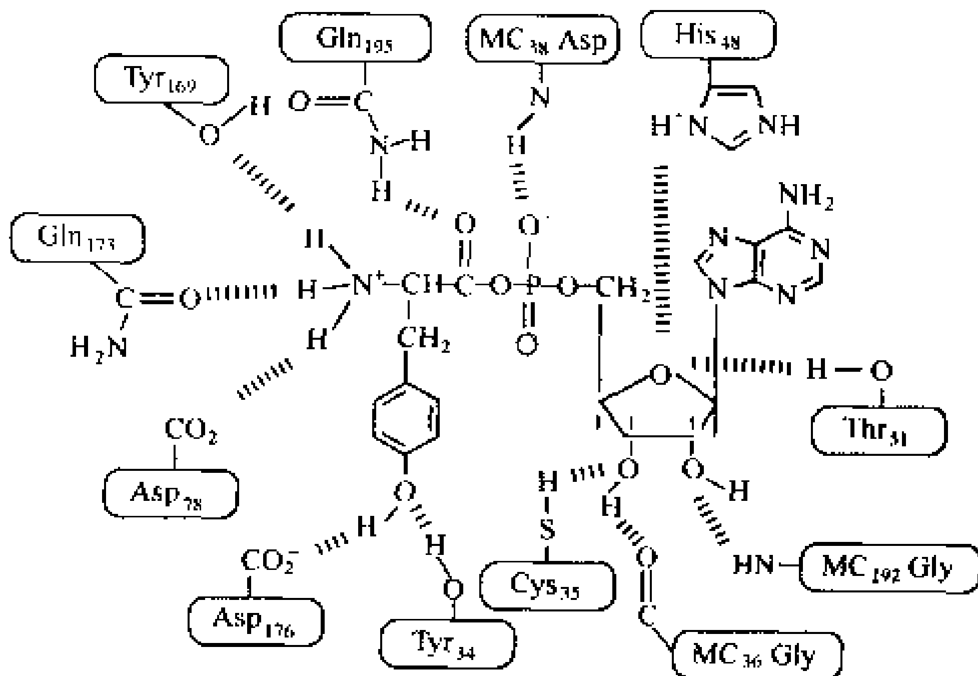
多次内反射示意图

多次散射 multiple scattering 当样品厚度增加时，由入射光引起的散

射光在散射体中再次引起散射的现象。多次散射会导致散射图形的弥散。当样品极薄、透光率达 80% ~ 90% 时，可以忽略多次散射的影响。

多道扫描 multi-channel scan 指在出射狭缝板上开一系列的方形孔，它与出射狭缝一一对应。出射狭缝后对应安置一系列的光电倍增管。出射狭缝出来的光准确投射到光电倍增管的阴极窗上，可以一一进行检测。在光电光谱仪中，一个出射狭缝和一个光电倍增管构成一个通道，可接收一条谱线，多道仪器是安装多个（可达 70 个）固定的出射狭缝和光电倍增管，可接受多种元素的谱线。最后经过计算机处理后打印出数据或显示器显示。这样就实现了多道扫描。

多点识别 multipoint recognition 在分子识别、尤其是在酶、蛋白质以及生物膜等具有高度分子识别功能的生物体系所进行的天然识别过程中，主、客体分子之间常常不是只借助于一个结合位点，而是借助于多个结合位点和多种作用力协同作用，产生高度组织化、高特异选择性的识别。例如在生物体内蛋白质的合成过程中，一系列的氨酰基 tRNA 合成酶起着至关重要的作用。如下图所示的是以酪氨酸为基质的酶复合体活性部位周围的结构。活性中间体的酪氨酸基腺嘌呤酸通过 12 根氢键与酶蛋白结合，两者之间进行着精密的多点分子识别。



氨酰基 tRNA 合成酶对酪氨酸基腺嘌呤酸的多点识别

多分散度 polydispersity 又称分布宽度指数。是重均分子量与数均分子量之比。

多功能基离子交换剂 multi-functional group ion exchanger 基质表面键合或包覆上多种功能基团的离子交换剂。两性离子交换剂是最典型的多功能基离子交换剂，可以用于阴阳离

子的同时分离。如果将像胆汁酸这样的分子包覆到基质表面，由于其分子中既有阴离子基团，又有阳离子基团，而且还有非极性的疏水碳链，它将是一种可用于阴阳离子和中性有机分子同时分析的多功能固定相。

多管法 multiple-tube method 用于估算悬液中微生物（一般为细菌）浓度的一种方法。用一定体积的菌悬液接种3～5支含有适当液体培养基的试管，另3～5支含有同样培养基的试管，分别用较少体积的菌悬液接种，另一组试管以体积逐步减少的菌悬液进行类似的接种。培养后，检查每支试管是否出现细菌生长，生长通常出现于用较大体积菌悬液接种的试管。因为这些试管较可靠地接受了接种物中至少一个活的微生物。原始悬液中的活细胞的浓度，可以用统计学方法由阳性（生长）和阴性（不生长）试管计算。可用最大可能数量法（most probable number method，MPN）计量样品中的细菌数目，用于天然水和处理水的细菌学检查等。

多光束干涉 interference of multi beams 频率（波长）相同、振幅相等（或接近）、彼此间相位差固定不变的两支光相遇，会发生光的干涉效应，形成明暗交替的干涉条纹。如果有很多支这种干涉光相遇，则发生的干涉现象称为多光束干涉。多光束干涉形成的干涉条纹比双光束干涉条纹更明锐清晰，是一系列明锐的亮条（各干涉级次的主极大）、亮条之间强度较低的次亮条（次极大）及各主极大、次极大之间强度为零的暗条纹构成的干涉花样；相干光束越多，主极大亮条更亮、更细，与次极大的强度差值也越大，相邻两主极大亮条之间的次极大数目越多、但越暗。当相干光束数目多到一定程度时，各主极大呈现为非常细锐明亮的条纹，主极大之间的数目众多的次极大逐渐连成一片，成为主极大之间较暗的背景（已分不清各次极大条纹）。在分析仪器中常用的衍射光栅、法布里-珀罗（Fabry-Perot）标准具，所应用的就是多光束干涉效应。

多光子电离 multi-photon ionization 中性原子在辐射能或其他形式的能量激发下跃迁到较高能级，被激发的原子生成离子，并以多个光子的形式释放能量的现象称为多光子电离。

多核络合物 polynuclear complex 亦称多核配合物。指一个配合物分子中含两个或两个以上的中心离子的配合物。当某种配位体中的一个或两个配位原子同时同两个中心离子配位，从而使配合物内界中含有两个或两个以上的中心离子，这样的配合物称为多核络合（配合）物。许多金属离子都能形成多核络合物，例如大家熟知的 $AlCl_3$、$FeCl_3$ 实际是一种多核络合物，不少盐的水解产物亦是多核络合物。分析化学中可以利用形成多核络合物来分离和测定某种金属离子。

多环芳烃 polycyclic aromatic hydrocarbons; PAH 芳香环通过单键相连生成的化合物以及由两个或两个以上的芳香环共用两个邻位碳原子

缩合而成的稠环芳烃统称为多环芳烃。前者如联苯、三联苯等，后者如萘、蒽、菲、芘等。多环芳烃是常见的石油类燃料，煤焦油中也含有多环芳烃。多环芳烃也是工厂废气、废水或机动车发动机废气等大气以及河流污染的主要原因。有些多环芳烃有致癌作用。大多数多环芳烃具有振动精细结构特征的荧光，可用荧光光度法进行定量分析。

多基 polyradical 在一个分子内存在多于2个自由基中心时称为多基自由基，简称多基。多基有多种结构形式，最常见的是在高分子（或低聚分子）链上直接形成多个自由基中心（多为碳中心自由基），或在主链的侧枝上含有自由基基团（多为氮氧自由基）。对于多基的ESR理论解析类似于双基。

多级电离 multilevel ionization 在光源等离子区中，原子获得足够的能量后，可以使外层电子脱离原子体系，分裂为自由电子和离子。这种现象称为原子的电离。原子分离成一个电子和一个离子的过程，称为一级电离；一级离子再分裂成一个电子和一个离子的过程，称为二级电离；……以此类推，多级离子再分裂成一个电子和一个离子的过程，称为多级电离。

多角度激光光散射光度计 multi-angle laser light scattering photometer; MALLS 以激光作光源，对多个（如18个）角度的散射光同时进行检测的光散射检测器。小角激光光散射光度计虽然使用简单方便，但它只是一个角度的数据，不能得到高分子化合物的分子大小信息。MALLS 则可获得分子大小的信息。

多晶X射线衍射法 powder X-ray diffraction; XRD 利用多晶样品对X射线的衍射效应，记录和分析X射线衍射图，以测定样品中的物相或晶体结构的分析方法。样品通常为小块金属或粉末，若是后者，又称为粉末衍射法。利用多晶衍射法可以进行物相定性和定量分析，测定精确的晶胞参数、简单的晶体结构、样品的结晶度、织构、粒度、微晶的尺寸等。

多克隆抗体 polyclonal antibody; PcAb 指按传统方法免疫动物所获得的抗体。由于抗原物质常由多种抗原决定簇组成，免疫动物产生的抗血清便成为含有针对多种决定簇的抗体的混合物。

多孔玻璃 fritted glass 是一类和多孔硅胶很相似的无机硅胶，由碱性硼酸盐玻璃经高温分相，再用酸洗去碱性可溶相的产物。它的第一个特点是可以做到孔径分布很窄，对某一分子量范围的分离特别有效，选择性强，也有利于凝胶色谱分离机理的理论研究。第二个特点是孔性结构好，有利于试样分子的传质过程。

多孔玻碳电极 reticulated vitreous carbon electrode; RVCE 将一种具有网状多孔结构的玻璃碳材料，切成薄片，光线可从网孔中通过，做成与网栅电极性质相似的光透电极。

多孔层开口管柱 porous layer open tubular column; PLOT 在开口管内

壁上用适当的方法沉积上一层多孔性固体物质作为固定相进行分离的色谱柱。多孔性物质可为吸附剂，也可为载体，在上面涂渍固定液使用。多孔性物质作为载体用的又称为涂载体的开口管柱。有时也可先将多孔层物质与固定液相混合，再涂到毛细管内壁上。多孔层厚度以0.1mm较为适宜。这种色谱柱的内表面大、柱容量比较大，渗透性好，具有稳定、高效、快速等优点。

多孔高聚物PLOT柱 porous polymer beads PLOT column 该种色谱柱中填充的固定相为各种牌号的多孔的高聚物小球，这种类型的填料的特点是耐水性好，水的保留值很小且出峰尖锐可直接用气相色谱法测定有机化合物中的微量水分、含水样品及水中的有机化合物；应用范围很广，对极性和非极性化合物都有很好的分离能力；耐高温、保留值稳定、机械强度高、耐腐蚀性也好。适用于低挥发性烃、极性与非极性混合物的分离。

多孔硅胶 porous silica gel 孔隙度高的硅胶微粒。通常分为表面多孔硅胶和全多孔硅胶。

多孔聚合物气液固色谱柱 porous polymer beads GLS column 用不同极性的固定液对吸附型PLOT柱，如高聚物PLOT柱、碳层开管柱（CLOT）等，进行改性后的色谱柱。经改性后的PLOT柱将具有吸附和分配两种分离机理，因而同时具有吸附柱的高选择性和分配柱的高分离效能的优点。由于可供选择的固定液种类很多，因此用这种方法可以解决用单一柱型所难以分离的组分，如一些难分离的异构体组分等。

多孔石墨碳 porous graphitic carbon; PGC 又称陶碳（ceramic carbon）。是在高温下烧结而成的碳微粒。其平均粒径约3μm，含碳量在99.5%以上。其机械性能好、化学稳定性和热稳定性高，适用pH范围宽（pH = 1 ~ 14），是一类新型液相色谱填料。

多孔载体 porous support 又称多孔基质。是具有良好孔隙性的色谱固定相基质。分表面多孔载体和全多孔载体。

多量子滤波相关谱 multiple-quantum filtered - COSY spectroscopy; MQF-COSY 又称*P*阶量子滤波COSY谱。与双量子滤波COSY谱类似，但是相循环却不同。多量子滤波随着*P*阶的增加，滤掉的峰越多，$(P-1)$阶及低于$(P-1)$阶的自旋体系的峰均被消除。随着阶的增加信号强度损失增大。参见**双量子滤波相关谱**条。

多量子相干 multiple-quantum coherence 见**相干**条。

多量子相干的阶 order of multiple-quantum coherence 见**相干**条。

多量子跃迁 multiple-quantum transition 核自旋体系中核的磁量子数变化$\Delta m \neq 1$同时涉及到多个核的跃迁，称为多量子跃迁。AX自旋体系中的零量子跃迁、双量子跃迁都属多量子跃迁。参见**交叉弛豫**条。

多脉冲实验 multiple pulse experi-

ments 使用不同的脉冲和控制脉冲之间延迟时间 τ 的实验方法。根据不同的应用需要，可有各种脉冲序列的组合。应用多脉冲技术，可测定弛豫时间 T_1 和 T_2，提高非灵敏核的测定灵敏度，克服磁场不均匀对 NMR 谱的影响。近年来，在 NMR 中应用的 APT、INEPT 和 DEPT 等实验技术以及各种二维 NMR 谱，都是用多脉冲实验实现的。

多配基配合物 polyligand complex 由多个相同配体与某种中心离子形成的配合物。例如 $Ag(NH_3)_2^+$ 是由 1 个 Ag^+ 与两个相同配体 NH_3 形成的配离子。要注意多配基配合物与多元配合物的区别。

多普勒变宽 Doppler broadening 多普勒效应引起谱线的变宽。接收器接收到的不同频率的光，来自不同运动速度的原子，每一受激原子只对谱线轮廓内某些确定的频率有贡献，而不是对谱线轮廓内的全部频率都有贡献，因此，多普勒变宽是一种非均匀变宽。多普勒宽度 $\Delta\nu_D$ 为

$$\Delta\nu_D = 2\sqrt{2\ln 2}\frac{\nu_0}{c}\sqrt{\frac{kT}{m}}$$

式中，ν_0 是谱线轮廓的中心频率；c 是光速；k 是波耳兹曼常数；T 是绝对温度；m 是原子质量。在通常的火焰原子化条件下，多普勒变宽值在 $(5\times10^{-4})\sim(5\times10^{-3})$ nm 量级，比谱线自然宽度约大两个数量级。在常压和温度 1000～3000K 条件下，原子吸收线的轮廓主要受多普勒和洛伦兹效应共同控制。

多普勒效应 Doppler effect 当光源与检测器之间有相对运动时，检测器接收到的光源辐射光的频率会随着相对运动速度的不同而改变的现象。处于光谱光源或原子化器内无序热运动中的原子，从各个不同的方向向检测器运动，即使每个原子发出的光是频率相同的单色辐射，如果发光的原子运动方向背离接收器，则检测器接收到的光波频率较静止原子所发的光的频率低，反之，如果发光的原子运动方向向着接收器，则检测器接收到的光波频率较静止原子所发的光的频率高，即检测器接收到的光波产生频移，使谱线的变宽，这种现象称为光波的多普勒效应。多普勒效应的大小是发光原子运动速度和方向的函数，朝向或背向检测器以最高速度运动的原子放出的光波显示出最大的多普勒频移，垂直于检测器方向运动的原子放出的光波没有频移，以其他方向和速度运动的原子放出的光波产生中等程度的频移。

多取代苯化合物环上质子化学位移（δ）的经验式 *empirical formula of proton chemical shift (δ) attached substituted benzene ring* 一种^{1}H-NMR 化学位移的近似估算法。化学位移 $\delta(H—\phi)=7.27+\sum_o\Delta\delta_o+\sum_m\Delta\delta_m+\Delta\delta_p$，式中，$\phi$ 表示苯基，苯环上的取代基以角标 o、m、p 表示邻、间、对的取代位，$\Delta\delta$ 表示取代效应。当取代基为 CH_3 时 $\Delta\delta$ 分别为 −0.17，−0.09，−0.18；—OH 时为 −0.50，−0.14，−0.40；—OCH_3 时为

−0.43，−0.09，−0.37；−F 时 $\Delta\delta$ 为 −0.30，−0.02，−0.22；—CN 时为 0.27，0.11，0.30；—COOH 时为 0.80，0.14，0.20，—C_6H_5 时为 0.18，0.00，−0.08 等。

多色光 polychromatic light 相对于单色光而言对光的属性的一种称谓。通常指白光，波长包含整个可见光区（约 380～780nm）。

多同位素稀释法 multiple isotope dilution method 利用放射性作指示剂进行化学分析的一种方法。将含量分别为 W_1 和 W_2 的已知放射性比度为 S_0 的被测元素放射性同位素指示剂溶液，加到含有 W_x 被测元素的两份试样溶液中，分别测定两份试液的放射性比度

$$S_1=\frac{S_0W_1}{(W_x+W_1)} \text{和} S_2=\frac{S_0W_2}{(W_x+W_2)}$$

由此可以求出试液中被测元素的含量

$$W_x=\frac{W_1W_2(S_2-S_1)}{W_2S_1-W_1S_2}$$

多维 NMR 谱 multi-dimensional NMR spectra 是二维谱方式的延伸。当脉冲序列中引入两个时间变量，加上原来的采样时间的变量，实验所获得的自由感应衰减信号（FID）对这 3 个时间变量分别作傅里叶变换，所获得的是三维核磁共振谱。同理根据研究的目的可引进（$n-1$）个时间变量，对所获得的 FID 作 n 次傅里叶变换后获得的便是 n 维 NMR 谱。

多维色谱法 multi-dimensional chromatography 同时或先后利用多种色谱系统使样品达到满意分离的色谱方法。

多维色谱仪 multidimensional chromatograph 由两种或两种以上的色谱仪组合起来的，具有分离分析复杂样品中多组分功能的色谱仪。实际应用的多维色谱仪主要是二维色谱仪。使用同种流动相的多维色谱仪有二维气相色谱仪、二维液相色谱仪和二维超临界流体色谱仪。使用不同种类流动相的多维色谱仪有气相色谱-液相色谱联用仪、液相色谱-超临界流体色谱联用仪、气相色谱-超临界流体色谱联用仪和液相色谱-薄层色谱联用仪等等。

多维荧光光谱 multi-dimensional fluorescence spectra 亦称三维荧光光谱或总发光光谱。与普通荧光光谱不同点在于它能提供激发波长和发射波长同时变化时的荧光强度信息。有两种图形表示：等角三维投影图（isometric three-dimensional projection）和等高线光谱图。前者是一种直观立体图，空间坐标 X, Y, Z 分别表示发射波长、激发波长和荧光强度；后者以平面坐标的横轴表示发射波长，纵轴表示激发波长，平面上的点表示由两个波长决定的荧光强度，等高线上的荧光强度相等。多维荧光光谱可以在普通荧光计上，通过保持一定的激发波长增量，重复扫描发射光谱，再采集数据作图得到；或利用电视荧光计（videofluorometer），采用多色光照射样品，应用二维多道检测器检测荧光信号，用计算机实现实时采集数据作图得到。它不仅可用于多组分混合物的定性和定

量分析，更常用作一种光谱指纹识别技术用于环境监测、法庭判证和临床的辅助诊断等。

多用色谱仪 unified chromatograph 可以单独进行气相色谱、超临界流体色谱和微柱液相色谱操作，或在一次色谱分析运行中，改变流动相对同一样品依次进行两种类型的色谱操作的多用途色谱仪。这种新型的多用色谱仪，仅利用一个六通切换阀选择使用不同的流动相和采用不同的检测器进行检测，其结构简单又便于操作。因为全部组件都安装在一个柱箱内，当从一种色谱方法转变成另一种色谱方法时，减少了转变时间，从而限制了色谱峰的展宽。

多元配合物 polybasic complex 由三种或三种以上组分形成的配合物。包括三元混配配合物，三元离子缔合物，三元胶束配合物，多核配合物等。但通常仅指三元混配配合物，即指为满足中心离子配位数要求，由两种不同的配体与某种中心离子形成的配合物。例如，Mo(Ⅵ)能与 NH_2OH 和硝基磺苯酚 K 形成三元配合物。形成三元配合物的条件是：该中心离子应能分别与这两种配体单独发生配位反应；中心离子与一种配体形成的配合物必须是配位不饱和的，只有再与另一种配体配位后才满足其配位数要求。混配配合物中的两种配体可以都是有机配体，亦可一个是有机配体，另一个是无机配体。由于配位反应的空间位阻效应，一种配体最好是体积小的单齿配体，如 NH_2OH、H_2O_2、F^- 等，另一个最好是多齿配体。相对于单一配体的配合物而言，混配配合物更稳定，不仅是提高分析灵敏度的一种有效途径，且常常能改善其溶解性和可萃取性。

多元素空心阴极灯 multielement hollow cathode lamp 空心阴极是由几个被分析元素组成的一种光谱光源，优点是一种光源可以用于多种元素的测定。由于各元素的蒸发和激发特性差异，很难使各元素的放电条件同时都达到最佳，因此它的发射强度不如单元素空心阴极灯光源。由合金制造的多元素空心阴极灯，由于不同元素选择性溅射和蒸发，阴极表面晶格能低的金属容易溅射出来，易挥发元素优先蒸发，导致阴极中难溅射和难挥发元素的相对浓度增大，各元素的发射强度不断变化，经过一段时间的使用后，其中某些元素的发光强度衰减到很低，不能再用。由粉末冶金法制造的多元素空心阴极，效果较好，不产生选择性蒸发。多元素空心阴极灯多是针对特定生产需要而制造的，如用于钢铁工业的 Cr-Co-Cu-Mn-Ni多元素灯，用于玻璃工业的 Co-Cu-Fe-Mn-Ni 多元素灯等。

多元素无极放电灯 multielement electrodeless discharge lamp 石英放电管内含有几种被测元素卤化物，通过无极放电同时发射几种被测元素特征辐射的光谱光源。它有射频和微波激发两种方式，用 100Hz ~ 100MHz 的射频激发，光源稳定性高，自吸很小；用大于 100MHz 的微波激发，输

入光源的功率转为辐射的效率高输出强度大，使用寿命长。在操作条件下，放电管内各元素或化合物均为气相，不存在选择性挥发问题。它的发射强度不如单元素无极放电灯，价格比常用的空心阴极灯光源贵。

多元线性回归 multivariate linear regression 又称多元线性拟合。用最小二乘法拟合一个因变量与多个自变量，估计回归参数，建立多元线性回归方程的全部操作。它在分析测试中有广泛的应用。

多元线性回归分光光度法 multiple linear regression spectrophotometry 采用多元线性回归技术（MLR）处理测量数据的分光光度法。在分光光度法多组分测量中，吸光度测量数据一般采用多元校正方法（multivariate calibration）处理，而多元线性回归是其中最常用的方法之一。该法建立在最小二乘法的基础上，一般可分为两种类型。第一类是经典最小二乘法(classical least squares)，也称为AKC矩阵法或K矩阵法，即对吸光度数据按朗伯-比尔定律进行最小二乘处理；第二类是逆最小二乘法（inverse least squares)，也称为CPA矩阵法或P矩阵法，在这种方法中，吸光度按朗伯-比尔定律的逆形式处理，即将浓度表示成吸光度的函数。经典最小二乘法在整个计算中需进行两次矩阵求逆计算，计算稍复杂，但可利用全波谱的数据。而逆最小二乘法仅需进行一次矩阵求逆计算，但波长数的选择受到严格的限制。总的说来，多元线性回归分光光度法是一种常采用的也是较方便的多组分分析方法，但当组分波谱间重叠严重时，采用此法将引起共线性问题，系数矩阵易呈病态，甚至得不到合理解。对于此情况，目前已有岭回归光度法、加权多元线性回归光度法和逐步多元线性回归光度法提出。

惰性气体鼓泡吹扫脱气 sweeping degas by inert gas 将气源（钢瓶）中的惰性气体（通常是氦气）缓慢而均匀地通人流动相容器中，氦气分子将其他气体分子置换和顶替出去，而它本身在溶剂中的溶解度又很小，微量氦气所形成的小气泡对检测无影响。

E

俄歇参数 Auger parameter 一定能量的光子辐照下，能谱中最强的俄歇峰的动能减去同一元素最强光电子峰的动能。俄歇参数的值取决于X射线的能量，也可用于鉴别元素的化学状态。在X射线光电子能谱分析中，由于某些元素的结合能随化学环境的变化很小，难以有效地进行化学价态分析，而可以利用俄歇参数来进行化学状态的分析。因为俄歇过程涉及的三个能级的化学效应，其化学效应比结合能的变化明显，而俄歇参数的化学效应比俄歇动能还要明显些，因此可以用来进行化学态的分析，作为化学位移进行价态分析的补充。此外，俄歇参数可以消除荷电效应的影响，因此对荷电样品就不需要进行荷电校准。

俄歇电子 Auger electron 在俄歇发射过程中所产生的电子。当原子的内层能级受到电离而产生正空穴时，由于原子受激发而不稳定，遂有较外层的电子向内层的正空穴填充，在此退激发过程中必然伴随着能量的释放，从而使另一外层电子电离，此即所谓的俄歇电子。俄歇电子的能量与激发所采用的光子或电子的能量无关，仅与所涉及的能级有关。可以通过多种途径激发来产生俄歇电子，如光子、电子和离子。在表面分析中最常见的俄歇电子是由电子束或光子束激发产生的。

俄歇电子产率 Auger electron yield 当原子的内层能级受到电离而产生正空穴时，由于原子受激发而不稳定，遂有较外层的电子向内层的正空穴填充，在此退激发过程中必然伴随着能量的释放。其释放途径有二种，一种是发射X射线，而另一种是发射俄歇电子，发射俄歇电子占总过程的比率就是俄歇产率。俄歇产率与激发源的能量和原子序数有关，低原子序数的原子其俄歇产率较高，高原子序数的原子其荧光产率较高。

俄歇电子能谱 Auger electron spectroscopy; AES 通过测量俄歇电子的强度与能量从而获得固体表面组成等有关信息的技术。俄歇电子能量较低，在样品中射程很短，故俄歇电子能谱法非常适用于样品表面1nm厚度层以内的物质研究和分析，对单分子层物质也有很好的检测效果。俄歇电子能谱法已用于固体表面元素氧化态、聚集态及表面污染等分析的研究，是一种常用的表面分析方法，与离子枪结合还可以获得深度剖析的信息，同时它可以分析除氢氦以外的所有元素。与X射线光电子能谱相比，由于电子束的可聚焦性，因此俄歇电子能谱可以进行微区分析或进行线扫描或元素面分布分析，非常适合薄膜材料的表面与界面分析。参见**俄歇电子**条。

俄歇电子像 Auger image 用电子束对样品表面的某一区域进行逐点扫

描，同时用探测到的某些元素的俄歇电子信号调节与上述扫描同步的阴极射线管的亮度，得到的样品表面信息的显微图像。对样品某一区域进行逐点扫描，同时分析俄歇动能从而获得俄歇元素的面分布像。与电镜像不同的是俄歇电子像与样品的形貌无关，仅与元素的分布有关。该方法获得的图像是表面元素分布像，其取样深度小于3nm。目前最先进的俄歇谱仪的俄歇电子像的空间分辨率可以达到10nm。

俄歇动能 Auger kinetic energy 即俄歇电子的能量。因为俄歇电子的动能与激发源能量无关，仅与俄歇电子激发过程所涉及的原子轨道的结合能有关，是原子性质的特征能量，因此可以根据俄歇电子的动能直接鉴别元素。俄歇电子动能基本上等于内层轨道的结合能减去两个外层轨道的结合能。

俄歇化学位移 Auger chemical shift 因原子化学环境变化而引起的俄歇峰能量的变化。实验上，俄歇化学位移的值就是样品中某一俄歇跃迁电子的能量减去纯元素的相同俄歇跃迁电子的能量。俄歇化学位移是俄歇电子能谱进行化学状态分析的主要手段之一。一般来说俄歇化学位移的大小要比XPS的化学位移大得多，但其能量分辨率稍差。理论上，其值与俄歇过程所涉及的三个能级的结合能化学位移有关。一般可以用三个影响因素来描述，按其影响大小分为电荷势效应，电负性效应以及原子弛豫效应。

俄歇化学效应 Auger chemical effects 因化学键合等因素引起元素俄歇峰的变化，主要包括俄歇电子能量的变化和俄歇线形的变化。在元素的化学环境发生变化后，由于电子的电离，使得各轨道能级的能量发生微小变化，就形成了化学位移。同时，由于电子相互作用，尤其是多电子过程，不仅会影响能量的变化，还会影响俄歇跃迁几率的变化，使得某些俄歇峰的出现也和元素所处的化学环境有关。此外，由于电子态的改变，其俄歇峰的形状也会产生很大的变化，这就是俄歇线形的变化。俄歇化学效应是非常普遍的，并包涵了大量的化学信息。但在一般的俄歇电子能谱分析中较少利用其化学效应，主要原因是其解释很复杂以及没有标准数据可以参考。

俄歇基体效应 Auger matrix effects 由于发射俄歇电子元素的物理环境（如非晶态/晶态、薄层/厚层或粗糙/平滑表面）改变，而不是因为化学键或浓度改变而导致俄歇谱（或线型或信号强度）的任何变化。俄歇基体效应的影响因素复杂，很难用一种表达式来描述。一般对信号强度的影响较大，对俄歇线形的影响主要是使峰形加宽以及峰形不对称，但一般不影响峰的位置。

俄歇扫描电镜 scan Auger microprobe 是利用俄歇信号获得样品表面图像的一种方式。主要利用俄歇电子能谱仪的电子束对样品表面进行逐

点扫描，同时利用俄歇电子能谱的能量分析器对每个样品点发射出的俄歇电子的能量进行分析，这样就可以获得元素的信号强度与样品位置的关系，在计算机上就可以获得与电镜照片类似的图像。与电镜相比，该图像仅表示元素分布或化学价态分布的信息，与表面形貌无关。

俄歇深度分辨 Auger depth resolution 俄歇电子能谱的纵向深度分辨能力。主要取决于俄歇电子的能量和样品材料的种类，也与平均自由程有关。在实际应用上，可以用剖面分析的两种介质间的理想锐界面的信号从16%增大至84%时的深度范围来测定。理论上俄歇的深度分辨率很高，可达到1～2nm，但离子束的溅射粗糙效应以及离子束混合效应都会导致其有不同程度的降低。

俄歇深度分析 Auger depth analysis 利用惰性气体离子溅射剥离样品表面原子层，同时或交替地利用俄歇电子能谱进行元素强度的俄歇分析，这样可以获得元素沿深度方向的分布情况。利用俄歇的化学效应，还可以获得化学价态沿深度方向的分布情况。是分析薄膜材料界面的最有效方法。在普通的深度分析中通常采用Ar离子枪作为溅射源，与同时分析相比，利用交替的方式进行俄歇信号的收集，具有更高的深度分辨能力。为了提高深度分析的准确性，降低离子束对样品的轰击效应和择优溅射效应，应该适当提高离子束的溅射速率和降低溅射时间。为了降低离子束溅射不均匀的效应，应尽可能提高离子束与电子束的束斑比率。

俄歇线扫描 Auger line scan 是扫描俄歇电子能谱仪的一种微分析方式。主要是利用电子束逐点对样品表面某一直线方向进行扫描，同时利用能量分析器获得特定能量的俄歇电子的信号，这样就可以获得俄歇信号强度沿着样品表面某指定线的分布图。线扫描分析对研究样品的微区以及大范围的元素分布分析很有效，其最高分辨率取决于谱仪的空间分辨率。

俄歇线形 Auger line shape 又名俄歇窄扫描。在所选定的俄歇峰附近10～30 eV范围内进行俄歇窄扫描，以得到精确的峰位和好的峰形。常用在测定化学位移，或者进行一些数据处理，如峰拟合、退卷积、深度剖析等。在俄歇线形中包含了大量的化学信息，因此是一种很有用的信息。一般可以通过扣背景的方法把俄歇线形从背景信号中提取出来，再通过一些数据处理解析出化学信息。

俄歇像 Auger map 显示来自某特定元素的俄歇电子在样品表面发射位置的二维像，一般是由入射电子束在样品表面做光栅式扫描，同时记录作为位置函数的某一特定俄歇跃迁信号强度，这是一种元素分布像，其分辨率取决于俄歇电子能谱仪的空间分辨率。

俄歇效应 Auger effect 又称自电离效应或预电离效应。指原子受激后，所发射的特征X射线未被发射出去，而在原子内部被吸收，进一步

发生电离并释放能量的过程，又称无辐射迁移或内部转换。当高能量子，如电子、X射线光子或质子与原子碰撞，将其内层电子击出时，所产生的空位必为较外层的电子所补充，并释放出迁移能量。若这部分能量以光的形式发射出来，则这种退激过程称为辐射跃迁，发出的X射线称为特征X射线；若退激过程不发射光子，而是将能量传给另一电子使之电离，则这种退激过程称为俄歇过程，发射的电子称为俄歇电子。因此，俄歇过程是一种无辐射跃迁，是一个与发射X射线互相竞争的过程。

俄歇信号强度 Auger signal intensities 在俄歇电子能谱的微分谱中即 $dN(E)/dE$，信号强度以俄歇特征线的峰-峰高度度量。在积分谱即 $N(E)$ 谱中俄歇信号强度用背景以上的俄歇峰高或峰面积度量。在现代的俄歇电子能谱仪中，积分方式已经成为主要方式。俄歇信号强度是一个很复杂的参量，与原子的电离截面、激发产率、俄歇产率、传输效率、元素含量、电子束强度等有关。一般难以用绝对定量的方式来表达。

俄歇跃迁 Auger transition 产生俄歇电子发射的跃迁，由相关的三个壳层（轨道）来表示。第一个字母表示含有初始空位的壳层，后两个字母表示含有因俄歇发射而产生的壳层（如KLM和LMN）。涉及键合电子时，则采用字母V（如KVV）表示；涉及的某一壳层为已知时，用下标表示（如 KL_1L_2）；更为复杂的俄歇过程（如多重初始电离和其他电子激发）可用一划线（如LL-VV和K-VVV）将始态和终态隔开来表示。当俄歇过程涉及来自与初始空位同一主壳层的电子时（如 L_1L_2M），称为科斯特尔-克隆尼希跃迁。若两个电子均来自与初始空位主量子数相同的壳层（如 $M_1M_2M_3$），则称为超科斯特尔-克隆尼希 super Coster-Kronig 跃迁。

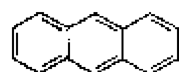
额定波长 nominal wavelength 光学仪器狭缝通过的强度最大处的波长称为额定波长。此波长两边的辐射强度都迅速降低。额定波长前、后两边，辐射强度等于 $\frac{1}{2}$ 额定波长强度处的波长范围称为谱带宽度或通带。

恶臭物质分析方法 foul odor analysis method 恶臭是低浓度、多成分的气态物质，其嗅阈值在 1×10^{-9} 级，一般在 1×10^{-6} 级。这样低的浓度和复杂的成分，单靠化学法或某一种仪器监测往往得不到满意的结果。因此为了监测恶臭物质，需要联合使用仪器法和嗅觉法，二者相互补充。如日本将氨、硫化氢、甲硫醇、甲硫醚、三甲胺、二甲二硫醚、乙醛和苯乙烯等8种物质作为控制对象，并用仪器和专家组进行测定。

用仪器监测一般包括采集、浓缩、气相色谱、分光光度法等手段，但由于污染引起的高空白值或由吸附而造成的损失，会使测定产生很大的困难。当恶臭为非单一成分时（多数情况下如此），采用测定各种组分的

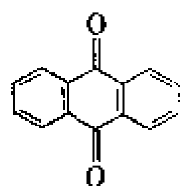
方法工作量太大，也难以收到预期的效果。此时可以利用人的嗅觉进行恶臭物质的官能实验测出恶臭的浓度。官能实验的结果以臭气浓度或臭气指数表示。臭气浓度不是物质的浓度，而是根据人的嗅觉来决定的一种无计量单位的数值。其关系式为 $Y = 10^x$。式中，Y 为臭气浓度；x 为稀释倍数的对数值。

蒽 athracence 分子式 $C_{14}H_{10}$。



无色针状结晶，易升华，有紫外吸收和荧光。含有并四苯、丁省时发黄绿色荧光。难溶于水，易溶于苯、乙醇中。煤焦油中含有大量蒽，是蒽醌类染料的原料。蒽基是重要的荧光基团。

蒽醌 anthraquinone 分子式

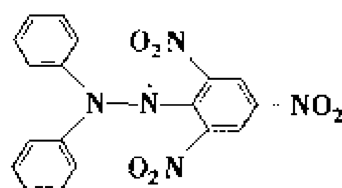


$C_{14}H_8O_2$。淡黄色结晶，难溶于水及有机溶剂，易溶于浓硫酸、浓硝酸。加热时可溶于乙醇、苯、氯仿中。由蒽氧化或苯与无水邻苯二甲酸缩合制得。是蒽醌类染料的原料。

蒽酮比色法 anthrone colorimetry 一种测定总糖含量的方法。单糖类遇浓硫酸脱水生成的糠醛衍生物能与蒽酮缩合成蓝绿色化合物，在 620nm 有最大吸收。糖的量在 20 ~ 200mg 范围时遵守比尔定律，用葡萄糖标准溶液制作工作曲线，求得以葡萄糖计的总糖含量。

儿茶酚胺 catecholamine 又称邻苯二酚胺。儿茶酚胺包括多巴胺、肾上腺素和去甲肾上腺素。它们在肾上腺髓质的嗜烙细胞利用细胞外液中的络氨酸合成肾上腺素和去甲肾上腺素，以肾上腺素为主，交感神经末梢亦能释放去甲肾上腺素。它们具有升高血糖和游离脂肪酸水平的作用，还可升高血压。患交感神经系统肿瘤时，血液和尿中儿茶酚胺及其代谢物增加。

二苯基苦基肼 diphenyl picrylhydrazyl；DPPH 一种稳定的自由基，作为电子自旋共振（ESR）测试时的标准样品，常用于确定样品的 g 值或自旋数。DPPH 粉末样品的 g 值为 2.0036。若配制成苯溶液，其 g 值为 2.00354。



二次电池 secondary cell 可反复进行放电、充电的电池，如铅蓄电池和碱性蓄电池。二次电池可用于移动电话、汽车电源及袖珍家用电器制品等等，用途很广泛。

二次电子倍增器 secondary electron multiplier 在质谱仪中，使微弱的离子信号放大的装置。离子撞击特殊处理过的阴极（又叫倍增极）表面，使其激发出二次电子，在加速电压作用下，二次电子定向运动轰击下一级电极，激发出更多的二次电子，依此类推，逐级增加，可达到 10^6 以

上的增益系数。

二次化学平衡 secondary chemical equilibria；SCE 人们将能影响溶质在流动相和固定相之间的分配平衡，使色谱峰达到正态分布，所采用的化学平衡步骤，称为二次化学平衡。它使色谱柱中某物质的浓度或形态发生变化而影响分配，有效地控制溶质在流动相和固定相之间的分配，从而达到了相对好的分离。二次化学平衡是HPLC中完成复杂物质分离十分有效的步骤。

二次微分谱 second-derivative spectrum 与核磁共振谱相比，电子自旋共振谱的峰宽一般都很宽。因此为了便于峰的定位和谱图的解析，测试电子自旋共振谱时一般都记录一次微分谱。但即使如此，有时还是不足以确定峰的位置，所以有时要记录二次微分谱。

二次压片法 twice disk method 又称夹心压片法。一种红外测量使用的微量固体制样方法。它要经二次压片。有两种制样方法，一种是在φ13×1mm钢片中打一小孔，放入压片机中，加入10mgnKBr，以1.034×10^8Pa压力压成透明片，再在KBr片的中心用注射器针头挖一不穿透的小孔，在小孔中滴加0.1μl溶液，在红外灯下挥去溶剂，再在小孔中加入适量KBr粉，再次压片。将压制好的试样放置在样品架上，使用聚光器附件测量红外光谱。另一种是在一片φ13mm较厚的KBr毛坯上钻一个φ1mm盲孔，将KBr粉放在孔中，缓缓加入样液，待溶剂彻底挥发干净后，在孔内再加少许KBr粉，将KBr片再压一次。测量时要用相应的微孔挡片以使光束仅通过微量样品区。

二次中性粒子质谱法 secondary neutral mass spectrometry；SNMS 又称为溅射中性离子质谱法（sputtered neutral mass spectrometry；SNMS）。是广义的二次离子质谱法的一种。与传统的二次离子质谱法的区别是：它不是检测样品溅射出的二次离子，而是将溅射出的中性粒子进行后离子化，然后再进行质谱分析。该方法离子化率对原材料依存性（基质效应）比较小，灵敏度更高，再现性也较好。适合于微量元素和组分的定量分析。

二电极体系 two-electrode system 由两个半电池组合而成的体系，加上电压即有电流通过（电解），可得知两电极之间的电位，但无法知道电极在怎样的电位下发生的反应。

二噁英 dioxin 多氯代二苯并对二噁英（PCCDs）和多氯代二苯异呋喃（PCDFs）的总称，是一类具有高毒性的三环杂环含氯芳烃有机氯污染物。依据氯原子的数目和位置的不同，共有75个同类物，其中2,3,7,8-TCDD(2,3,7,8-tetrachlorodibenzodioxin)在二噁英中毒性最强，比氰化钾还要大几百倍，长期接触二噁英将导致人体生殖系统、神经系统受损，导致胎儿畸形。

二级标准物质 secondary reference material 又称为工作级标准物质。

采用准确可靠的方法或直接与一级标准物质相比较的方法测量其特性量值，均匀性、稳定性和定值准确度能满足现场测量和例行分析工作的需要，经国家有关计量主管部门批准颁布和授权生产并附有证书的标准物质。主要用作现场与例行分析的质控标准。

二级电离 second level ionization 一级离子再电离出一个电子和一个离子的过程，称为二级电离。参见**多级电离**条。

二级离子线 second level ionic line 在激发光源的作用下，由二级电离所发射的谱线。在光谱学中，中性原子线用罗马数字Ⅰ表示，一级离子线用Ⅱ表示，二级离子线用Ⅲ表示，以此类推。

二极管阵列检测器 photodiode array detector; PDA 以光电二极管阵列（或CCD阵列，硅靶摄像管等）作为检测元件的检测器。它可构成多通道并行工作，同时检测由光栅分光，再入射到阵列式接受器上的全部波长的信号，然后，对二极管阵列快速扫描采集数据，得到的是时间、光强度和波长的三维谱图。与普通紫外检测器不同的是，紫外检测器是先用单色器分光，只让特定波长的光进入流动池。而二极管阵列检测器是先让所有波长的光都通过流动池，然后通过一系列分光技术，使所有波长的光在接受器上被检测。PDA可提供溶质的部分定性信息，新型色谱仪已开始采用这种检测器代替普通紫外检测器。它具有坚固、稳定、功耗小、工作电压低以及线性动态范围大、电磁干扰小等优点；其缺点是检测阵列元尺寸较大、阵元个数较少，常用的PDA多为线形一维，阵元数为512、1024个，商品化的二维PDA少见。此外其噪声和暗电流较大、量子效率较低，因而检测灵敏度不太高。近年来，随着CCD检测器的发展，PDA常被CCD所替代。

4,4-二甲基-4-硅代戊磺酸钠 sodium 4,4-dimethyl-4-silapentane sulfonate; DSS 也称三甲基硅丙磺酸钠。白色固体粉末，较易溶于水，用作NMR测量时的内标。使用浓度低于$10mg \cdot g^{-1}$（1%）时，它的CH_3基团可作δ（^1H）基准，而另外有3个亚甲基的δ（^1H）在0.5～3.2区间内，埋在基线噪音里，基本不干扰对试样的观测。含芳环的化合物可能与它发生厌水性缔合，可使内标准信号右移0.1至0.8。

二聚离子 dimeric ion 分子离子与分子M加成生成的离子$[M_2]^{+\cdot}$。与此类似，分子离子与多个分子M加成生成的离子$[M_n]^{+\cdot}$称为多聚离子。

二维长（远）程耦合同核化学位移相关谱 long range homo nuclear two dimensional chemical shift correlation spectrum; 2D-LR-COSY 利用LR-COSY脉冲序列可以检测直到相隔4～5键的质子之间远程耦合，其J值在0.1～0.5Hz之间。基本脉冲序

列为 90° $-t_1-\Delta-\alpha^0-\Delta-$ 全回波采样（t_2）。该法在演化期末插入一个固定延迟（$\Delta\approx0.3\sim0.5$s）从而延长 t_1 以便使 J 值小的远程耦合的磁化转移而得到增强，却又减少了反映 ^3J 耦合的交叉峰。脉冲序列因采集全部回波信息，可减少这种小 J 相关信息的损失，增加其检测灵敏度。因此提供了丰富的耦合信息。为了确定是否是远程耦合的交叉峰，常常将它与一般的 COSY（90°）谱相比较，从而进一步确证分子骨架与结构，此法在结构分析中很有用。

二维等线图 two dimensional contour plot 又有等位图与轮廓图之称。是将二维谱图以类似于俯视图形式或者类似于地图等高线的形式，将不同强度下的谱峰的水平截面重叠在一起绘出的图。这样相互近似的多个同心圈表示谱峰，其中心为谱峰的位置，同心圈圈数目多少表示谱峰强度大小，最外圈表示较低截面轮廓图，而内圈依次表示强度增高的截面轮廓图。其优点在于能较准确读出峰位，作图较快。广为采用。其缺点在于有时可能会遗漏低强度的谱峰。

二维电子-电子双共振 two-dimensional electron-electron double resonance; 2D-ELDOR 与常规的电子-电子双共振（ELDOR）不同，测定 2D-ELDOR 谱只需一个微波频率源。2D-ELDOR 的脉冲序列为 90° $-t_1-$ 90° $-T-$ 90° $-t_2$。在演化期 t_1 内的一个进动频率，因在混合期 T 内发生磁化转移，在检测期 t_2 内转换成另一个进动频率，这个过程相当于电子-电子双共振。固定 T，在不同的 t_1 下记录检测期的自由诱导衰减曲线，再经过两次傅里叶变换就可得到 2D-ELDOR 谱。与二维相关电子自旋共振谱（COSY-ESR）不同，因海森堡交换作用引起磁化转移，而海森堡交换作用与核自旋的跃迁选律无关，所以在 2D-ELDOR 谱中可观测到所有自相关峰之间的相关交叉峰。测量自相关峰和相关交叉峰的相对强度可直接确定海森堡交换速度。

二维电子自旋回波包络线调制 two-dimensional electron spin echo envelope modulation; 2D-ESEEM 采用常规的三脉冲序列（90° $-\tau-$ 90° $-\tau'-$ 90° $-\tau-$ 回波），分别改变 τ（t_1）和 τ'（t_2），则所测定的电子自旋回波强度是两个时间 t_1 和 t_2 的函数，经过两次傅里叶变换，就可得到三脉冲 2D-ESEEM 谱。2D-ESEEM 谱的交叉峰表示了属于同一电子自旋的超精细子能级之间的相关性，可以指认由不同核引起的超精细裂分峰组及确定超精细耦合常数相对符号。三脉冲 2D-ESEEM 谱中，由 t_1 的时域谱转换成频域谱的峰的峰宽由横向弛豫时间决定，而来自 t_2 的频域谱的峰的峰宽则由纵向弛豫时间决定，所以前者的频率轴上峰的分辨率远远低于后者。有关四脉冲 2D-ESEEM 谱，参见**超精细子能级相关谱**条。

二维堆积图 two dimensional stacked trace plot 一簇一维谱线以固定错开形式依次紧密错落在一起形成

的富有立体感的三维图谱。它类似透视图，非常直观。绘图时出于清晰的要求，对峰后所隐藏的任何较小峰会被“洗白”而见不到。由于作图耗时较多，且不便读出谱峰的确切位置，因而较少使用。

二维核磁共振谱 two-dimensional NMR spectra 以体系的两个频率性质为独立变量，由自由感应衰减(FID)信号作两次傅里叶变换所获得有关谱学信息的图谱，简称二维谱。在PFT-NMR实验所用的射频脉冲序列中，人为引入一个独立变化的时间变量t_1，加上原有采样时间的变量t_2，这样在所获得的一系列的时域的FID(t_1,t_2)信号中皆蕴藏有两个时间的变量(t_1,t_2)。对这两个时域变化分别作傅里叶变换，所获得的是一簇与变量T_1相关的一维谱图，务必用三维空间来表示。其中平面二维分别是两个独立的频率坐标，空间第三维为强度坐标。这样的谱学信息簇为二维谱。最常见的二维谱图是记录成等高线图，纸平面上的纵坐标与横坐标皆为频率坐标，而垂直于平面方向上的强度信号为封闭圈。圈越大，越多表示信号强度越强。二维谱图有时也可绘成堆积图，这一簇一维谱线以固定错开的形式依次紧密错落在一起形成富有立体感的三维图谱。

二维核欧沃豪斯效应谱 two dimensional nuclear Overhauser effect spectroscopy; NOESY 借助于交叉弛豫完成磁化传递的二维实验，称为NOESY。化学交换也相当于一种弛豫作用。由于核间交换了它们的化学位置引起了核间磁化传递的二维谱称为交换谱。NOE二维谱和化学交换谱所用的脉冲序列基本相同

$90° - t_1 - 90° - \tau_m - 90°$ - 采集 FID(t_2)

其中，τ_m应根据交叉弛豫或化学交换的速率而设定的参数。所测得图谱中对角线峰表示体系中存在着该化学位移δ处的特定基团上的被测核，而出现的交叉峰表示与其对应的两种基团的被测核之间存在着交叉弛豫或化学交换。NOESY测量交叉弛豫，确定NOE效应，从而可以了解分子内、分子间有关核之间在空间的距离，这对于研究生物大分子中的构型、构象极其重要，而交换谱则主要用于研究体系中化学基团之间的动态交换过程，获得交换率以及结构、构型的变化等信息。

二维交换谱 two dimensional exchange spectroscopy 见**二维核欧沃豪斯效应谱**条。

二维NMR谱的分类 classification of two dimensional NMR spectra 大致可以分3大类。第1类为J分辨(解)谱，简称J谱。它将化学位移δ和自旋耦合作用的耦合常数J分别表述在横坐标和纵坐标上。因此也称为δ-J谱。在演变期t_1和探测期t_2之间，不存在混合期和混合脉冲，不同核的磁化之间没有转移为特点的实验。对于同种核素则为同核J谱，而对于异种核素为异核J谱。第2类为化学位移相关谱，在t_1与t_2周期间存在混合期和混合脉冲，不同核的磁

化之间有转移为特点的实验。两个频率坐标皆为化学位移，并将指示共振信号之间的关联，因此也称 δ-δ 相关谱。它有 3 种，第 1 种，不同核的磁化转移是通过 J 耦合作用传递的耦合相关谱，分为同核耦合与异核耦合。第 2 种，若在 k 和 l 核磁化之间的转移是通过与中间核 x 的 J_{kx} 和 J_{xl} 耦合传递的，便是中继相干转移二维谱。第 3 种又有两种情况，若不同核是通过纵向磁化之间的交叉弛豫（偶极相互作用）来传递的，便是 NOE 相关谱；若是通过纵向磁化间的化学交换来传递的是化学交换谱。第 3 类为多量子谱。连续谱方式测量 NMR 是基于单量子跃迁，用 PFT-NMR 方式除了可以利用单量子跃迁（$\Delta m_I = \pm 1$）获得 NMR 信息外，还可以利用在预备期建立的多量子相干，这种实验称为二维多量子谱。如果探测期接收到的不是来自所有各阶量子相干的信号而是只接收来自某阶量子的相干的信号，这种实验为多量子滤波二维谱。$|\Delta m_I| \neq 1$ 的多量子跃迁的脉冲序列来获取特定的 NMR 信息，这是多量子跃迁的二维谱。

二维 NMR 谱脉冲序列的时序图 pulse scheme about two dimensional spectra 二维 NMR 谱脉冲序列，总体上以时间顺序的先后可分为 4 个时期：预备期-演化期-混合期-检测期。预备期是使体系充分恢复到原始热平衡状态，然后在预备期的末尾，对体系施加一个或几个脉冲使体系激发，使之处于非平衡态。演化期也称发展期，根据研究的目的设计顺序变化的时间参数（记以 t_1）。混合期（记以 t_m）对演化期末的 NMR 有关信息创建一个信号检出条件，当演化期末的信息已可以检测时，可不用混合期，因此它的存在视二维谱实验目的而定。检测期（记以 t_2）则是以通常方式采集 FID 信息。

二维谱图形表示法 form of chart expression about two-dimensional spectra 二维谱图形表示法有堆积图、等高线圈、剖面图与投影图 4 种。一维谱图是以平面上表示某频率域内的信号强度与相应频率的关系。二维谱则应表示性质不同的两个频率域内的信号强度与相应频率的关系。因此，一个二维谱的图形原则上应以三维立体空间表示。为此可采用堆积图、等高线图来表示，最常用的是等高线图。另有剖面图和投影图，可从中获取更详细的信息。为详细了解有关峰的频率、振幅、峰形等定量结果，常专门将其用分离谱（如一维图谱）逐一表示，此即剖面图（cross-sections）。绝大多数剖面图的频率维平行于某一频率轴。少量的则与频率轴成 45°（如同核 J 分解谱）。投影图（projections）是对一定频域内的所有剖面图，按频率将所有信号强度分别进行积分所得的图。参见**二维堆积图条**、**二维等线图条**。

二维色谱法 two-dimensional chromatography 利用切换阀或多通阀转换，中间转向展开（平板色谱）等手段，使样品同时或先后在两个不同

色谱体系上进行分离的色谱方法。

二维天然丰度双量子转移实验 two dimensional-incredible natural abundance double quantum transfer experiment; 2D-INADEQUAE 在一维天然丰度双量子转移实验中，将产生多量子相干的脉冲部分是准备期，随后的 Δ 改成演化期 t_1 以建立双量子频率域，检测的^{13}C卫星峰的幅度在 t_1 期间受双量子跃迁调制。经最后一个90°脉冲作为读脉冲使 t_2 期间检测出双量子相干，经二维 FT 后，F_1 和 F_2 域分别为双量子跃迁频率与^{13}C化学位移。因为两个^{13}C耦合$^1J_{CC}$构成同核二核 AX 体系，它仅有的双量子跃迁的频率等于两个耦合的^{13}C的化学位移的和，因此若这两个碳具有完全相同的双量子跃迁频率，即可确定它们相邻。根据此，在 2D-INADEQUATE 谱中，一对耦合的碳具有相同的双量子跃迁频率，可用水平线联系在一起，并一一找出C—C连接顺序。2D-INADEQUATE 实验是目前对^{13}C谱指认，确定有机分子碳骨架的最有效的方法。参见**天然丰度双量子转移实验**条。

二维同核 J 分辨(解)谱 Homonuclear two dimensional J resolved spectroscopy 直接反映化合物由同种核(通常是^1H核)所在化学基团的化学位移与基团之间的耦合关系-耦合常数的一类 NMR 图谱。脉冲序列为 $90°_x - \frac{t_1}{2} - 180°_y - \frac{t_1}{2}$ - AQ(采集 FID)(t_2) 对于 AX 二自旋体系($I=\frac{1}{2}$核)，90°$_x$脉冲作用于体系，使 A 宏观磁化矢量倒向 y' 轴，受 X 偶合的两支横向磁化矢量 A_1 与 A_2(强度为 I_{A1} 与 I_{A2})在平面上散开，速度分别为 $2\pi(\nu_A \pm J/2)$，经 180°$_y$脉冲作用这两支横向磁化矢量 A_1 与 A_2 的运动速度互相调换。到达第二个$\frac{t_1}{2}$的终点时使化学位移重聚焦，并消除了磁场不均匀性的影响，便有：$\phi_{A1}=\pi-\pi Jt_1$ 以及 $\phi_{A2}=\pi+\pi Jt_1$，A 信号受 J 所调制。在采样时间的 t_2 期间有：$\phi_{A1}=(\pi-\pi Jt_1)+2\pi\left(\nu_A-\frac{J}{2}\right)t_2$ 与 $\phi_{A2}=(\pi+\pi Jt_1)+2\pi\left(\nu_A+\frac{J}{2}\right)t_2$，它们的信号强度分别是 $I_{A1}\propto \exp[i(\pi-\pi Jt_1)]\cdot\exp[i(2\pi\nu_A-\pi J)t_2]$ 和 $I_{A2}\propto\exp[i(\pi+\pi Jt_1)]\cdot\exp[i(2\pi\nu_A+\pi J)t_2]$。同理，X 核信号强度 $I_{X1}\propto\exp[i(\pi-\pi Jt_1)]\cdot\exp[i(2\pi\nu_X-\pi J)t_2]$，和 $I_{X2}\propto\exp[i(\pi+\pi Jt_1)]\cdot\exp[i(2\pi\nu_X+\pi J)t_2]$。可见 A、X 二信号都受到 t_1 函数的相位调制，调制频率为 $\pm\frac{J}{2}$，经二维傅里叶变换后，构成与常规一维谱相同的以 δ 为横轴（F_2 或 ω_2 频率轴）及耦合常数 J 为纵轴（F_1 或 ω_1 频率轴）的2D-J 谱。在$(\omega_1,\omega_2)=(\pi\mp\pi J, 2\pi\nu_A\mp\pi J)$处出现共振峰 A_1、A_2，在$(\omega_1,\omega_2)=(\pi\mp\pi J,2\pi\nu_X\mp\pi J)$处出现共振峰 X_1、X_2。为了清晰起见，可用计算机将数据旋转一个角度，便可将 δ

与 J 完全分离,从横坐标直接读取化学位移,从纵坐标直接读取耦合常数。同核2D -J谱广泛应用于常规谱中耦合重叠得多的谱区将化学位移与耦合常数一一分开,直接读出,从而寻找出基团之间的耦合关系和连接关系。

二维相关电子自旋共振谱 two-dimensional correlated electron spin resonance;2D COSY-ESR 与 NMR 的 COSY 谱类似,对于 ESR 也可测定 COSY 谱。采用的脉冲序列为 $90° - t_1 - 90° - t_2$,其中 t_1 为演化期,t_2 为检测期。对于每一组(t_1,t_2)都可观测到相应的自由诱导衰减(FID)信号,通过两次傅里叶变换就可得到 COSY-ESR 谱。在 COSY-ESR 谱中,因很多样品中电子-电子偶极作用和化学或海森堡交换作用很弱,所以经常观测不到表示峰-峰相关的交叉峰。

二维异核 J 分辨谱 Heteronuclear two dimensional J resolved spectroscopy 以 X 核(^1H 核以外的其他核)化学位移为横坐标,以 ^1H 核与 X 核这两种核之间的耦合常数 J_{HX} 为纵坐标的 NMR 谱。与同核二维 J 谱相类似,但观测核是 X 核如 ^{13}C 核,为了保存 J_{HX} 之间的信息,务必在对 X(^{13}C)核施加 180° y 脉冲的同时对 ^1H 也施加 180° 脉冲。$^{13}C—^1H$ 异核二维 J 谱具有对 ^1H 不去耦的碳谱全部信息,但从谱图上很容易读出各碳的 δ,直接键合 ^1H 的数目,精确测定小分子的异核耦合常数,区分 $—CH_3$,$—CH_2—$,$>CH-$ 与 $>C<$ 基团。

二向色性 dichroism 有些晶体(如方解石、电气石)和一些光学各向异性的介质具有双折射性——使入射光变成两支特性不同的光:一支仍保持入射光特性、遵守光的折射定律,称之为寻常光,以 o 光表示;另一支光不遵守折射定律,折射率与 o 光不一样、折射方向也不一样,称之为非常光,以 e 光表示。有些双折射晶体(如电气石),对 o 光和 e 光的吸收率也不同,这种特性称之为二向色性。电气石对 o 光有强烈吸收,而对 e 光则吸收很少,所以从电气石晶片射出的光往往只剩下 e 光,大部分或全部 o 光被吸收而无出射。

二乙酸草镰刀菌烯醇 diactetoxyseripenol 是单端孢霉烯族化合物之一,化学名为 4β,15 二乙酸基-3α,7α-二羟基草镰刀菌-9-烯-8-酮。该毒素主要为雪腐镰刀菌,其次是表球镰刀菌和玉米赤霉。它会损害动物骨髓等造血器官,使白细胞持续减少,心肌病变出血,发生胃肠炎、眼和体腔水肿、抗体减少。检测方法主要有薄层色谱法和高压液相色谱法。

二元溶剂体系 dual solvent system 在液相色谱中,由两种不同极性溶剂的混合溶液作流动相的体系。根据分离的需要,可以选择不同的溶剂或两种溶剂的不同比例配制出合适极性的流动相。在液相色谱中,二元溶剂体系甚至多元溶剂体系经常使用。

F

发光标记试剂 luminescent labeling reagent 同时具有发光基团以及反应官能团的一类发光性分子。对于本身不发光的待测分子,可以用特定的发光标记试剂与之作用形成发光性衍生物,测定衍生物发光光谱随待测分子浓度的变化可以实现检测。发光官能团常用多环芳烃、芳香杂环化合物、二苯乙烯、硝基苯并呋喃等。发光标记是液相色谱中荧光检测的重要手段,可有柱前衍生、柱后衍生等。发光标记的原理还广泛应用于光化学传感器的研制中。

发光二极管 light emitting diode; LED 发光二极管是注入型电致发光器件,大多用Ⅲ~Ⅴ族化合物半导体材料制成,从垂直于 p-n 结面 p 区发光。目前已有能发射红、绿、黄、橙、蓝等颜色的种种发光二极管及所谓"超高强度"发光二极管。LED 的特点是小而轻、耐震、响应速度快(10^{-6} ~ 10^{-9}s),寿命长(>50000h)、单色性好,缺点是发光效率不高,有效发光面积不大。

发光分析法 luminescence analysis 分子或离子等吸收光、X 射线、放射线、电子束或化学反应等能量后,在较低的温度(4~500℃)下以紫外或可见光的形式发射能量,这种现象称为发光。利用发光现象对物质进行定性、定量等的方法称为发光分析法。根据所吸收的能量形式不同,发光分析法又被分为光致发光、化学发光、生物发光、X 射线荧光等。发光分析法是生物化学、生物物理的重要研究手段,在环境监控、临床化学、DNA 测序、基因分析等方面都有广泛的应用。

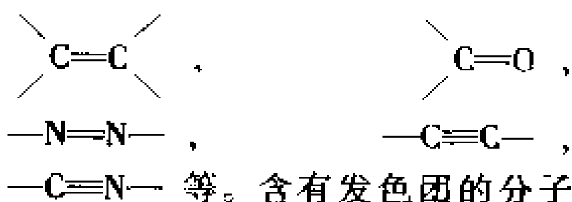
发光光谱仪 luminescence spectrometer 一般指荧光光谱仪,又称为荧光分光光度计。目前的荧光分光光度计可以同时进行荧光分析、磷光分析以及生物发光分析等。一般荧光光谱仪由光源、激发单色器、荧光池、发射单色器、检测器等组成。溶液荧光一般在与激发光成直角的方向测定,对于固体样品则使用特殊附件,测定与激发光成一定角度的反射荧光。利用荧光和磷光寿命的差别,通过选择仪器参数,可以测定溶液室温磷光。

发光量子产率 luminescence quantum yield 发光物质吸光后所发射光的光子数与所吸收的激发光的光子数之比值。在通常情况下,发光量子产率的数值总是小于 1。发光量子产率的数值越大,化合物的荧光或磷光越强。不发光的物质,其发光量子产率的数值为零或非常接近于零。重原子的引入常会使荧光量子产率减小,磷光量子产率增加。

发光强度 luminous intensity 一个向各方向发光的点光源,在某一方向的元立体角 $d\Omega$ 内发送的光通量 dF,表征了该点光源发光的强弱程度。发光强度的定义即为 $I=\frac{dF}{d\Omega}$。发

光强度的单位是坎德拉(cd),一个点光源向一单位立体角内发送的光通量为1流明(lm)时,它的发光强度就是1坎德拉。点光源向四面八方所发出的总光通量 $F=4\pi I$。

发色团 chromophores 亦称生色团。指分子中含有的能对光辐射产生吸收、具有 $\pi\rightarrow\pi^*$ 跃迁的不饱和基团。这类基团与不含非键电子的饱和基团成键后,使该分子的最大吸收位于200nm或200nm以上,摩尔吸光系数较大(一般不小于5000)。简单的生色团由双键或叁键体系组成,例如:



—C≡N— 等。含有发色团的分子称为色原(chromogen)。

发色团的共轭效应 conjugate effect of chromophores 当分子中各发色团的多重键(双键、叁键)仅被一个单键分开时,它们就处于共轭状态($\pi\rightarrow\pi$ 共轭)。此时 π 轨道重叠,相邻轨道能量差变小,其结果是吸收光谱红移,并常伴有吸收强度增大。共轭程度愈大,波长红移愈大。具有非键电子的多重键的共轭($n\rightarrow\pi$ 共轭)也会导致光谱变化。

发射光谱 emission spectra 原子受到电或热的作用由基态被激发到较高的能态,返回到基态或其他中间能态时,以辐射形式将吸收的能量释放出来,产生发射光谱。包括炽热固体在整个宽带范围内产生无任何细锐谱线的连续光谱,分子发射的带状光谱和原子发射线状光谱。

发射光谱分析 emission spectrometric analysis 利用试样中原子或离子所发射的特征光谱(原子发射光谱)或某些分子与基团所发射的特征光谱(分子发射光谱)的波长与强度,来检测元素的存在和它们的含量,称为发射光谱分析。其中原子发射光谱应用最普遍。原子发射光谱分析是通过下列过程来完成的:(1)将试样转变成气体状态并激发使之发射光子;(2)把光辐射用棱镜、光栅等分光仪器分解成光谱并进行测量,测量的方法有目视法、照相法、光电法等;(3)检定光谱中元素的特征谱线的存在与否或测量其谱线强度,就可以进行定性或定量分析。

法布里-珀罗干涉仪 Fabry-Perot interferometer 是一种可获得明锐细条纹的多光束干涉仪,由两块镀有高反射率膜层的平板构成。若两块平板严格平行,用有一定尺寸的光源(扩展光源)照射时,光在两反射面之间发生多次反射产生多支相干的光束。在光谱学研究和光谱分析工作中,用F-P干涉仪可获得极高的分辨率,适用于超精细光谱线分析。两平板上的反射膜(一般为银膜)反射率越高,透射光形成的干涉条纹也越细锐。

法定计量单位 legal unit of measurement 由国家法令规定强制或推荐使用的单位。1959年3月22日国家发布了一批法定单位,1984年2月27日中华人民共和国国务院发布

了《关于在我国统一实行法定计量单位的命令》，并颁布了《中华人民共和国法定计量单位（简称法定单位）》。自1991年1月起，除个别特殊领域外，不允许再使用非法定计量单位。法定计量单位以国际单位制为基础，包括全部国际单位制单位，和国家选定的某些非国际单位制单位。由这些单位按数学形式构成的组合单位，以及它们由SI词头构成的倍数与分数单位都属于法定计量单位。参见**国际单位制**条。

法拉第常数 Faraday constant；*F* 法拉第定律中的常数 *F*，定义为与流过1摩尔电子相关联的电量，1*F* 等于96485 $C \cdot mol^{-1}$。法拉第常数能通过物理的和化学的方法由实验来测定，测定法拉第常数的实验要满足：(1) 测定的反应必须进行完全，电流效率100%；(2) 没有电活性物质进入或离开电解池的样品仓。

法拉第电流 Faradaic current 在电极上由于某种化学物质的氧化或还原而产生的电流。

法拉第定律 Faraday's law 1833年由法拉第发现，表述电解过程中通过电解池的电量和电极上起了变化的物质的量之间的关系，即电解时，电极上发生变化的物质的量 *m* 与通过电解池的电量 *Q* 成正比。

$$m=\frac{M}{zF}Q$$

式中，*M* 为物质的摩尔质量；*z* 为电极反应中的电子数；*F* 为法拉第常数。

法拉第天平 Faraday balance 是最常用的磁天平，具有多种测量方式，但其基本原理相同。参见**磁天平**条。

法拉第筒 faraday cup 质谱仪中比较简单的一种离子接收装置。离子束流直接打到金属板或筒状金属电极（又叫法拉第筒）内，再经静电计或直流放大器将电信号放大。

法拉第型解调电流 Faradaic demodulation current 当指示电极或工作电极受到具有不同频率的两种相互调制的电位的作用时，由于与电极反应有关的调解作用而产生的电流。

法拉第型整流电流 Faradaic rectification current 当指示电极或工作电极上加上外加电位的平均数值为一定的任何周期性变化的电位时，由于电极反应的整流性质而产生的电流。

法拉第旋转 Faraday rotation 磁致旋光（参见**磁致旋光**条）也称为法拉第效应，这时的线偏振光的偏振面发生旋转，叫做法拉第旋转。

法拉第阻抗 Faraday impedance 由电极上的化学反应（发生氧化还原时因电荷跃迁和物质的扩散）而产生的阻抗。体系的法拉第阻抗随着电极反应的界面跃迁速度的大小而变化，从求出的法拉第阻抗可以知道电极反应的方式（如电极反应的控制步骤是电荷跃迁还是物质扩散，或是化学反应）、扩散系数、交换电流密度以及电子数等有关反应的参数。

法扬司法 Fajans method 利用荧光黄或曙红等吸附指示剂，以$AgNO_3$

滴定 Cl^-、Br^-、I^-、CN^- 等离子的方法。例如，若以荧光黄（以 HFIn 表示）为指示剂用 $AgNO_3$ 滴定 Cl^- 时，荧光黄在水溶液中离解为荧光黄阴离子（以 FIn^-）表示，呈黄绿色，带荧光。化学计量点前，溶液中 Cl^- 过量，AgCl 沉淀表面吸附 Cl^- 不吸附 FIn^-，化学计量点后，溶液中 Ag^+ 过量，AgCl沉淀表面吸附 Ag^+ 而带正电荷，吸附 FIn^-，在AgCl沉淀表面生成粉红色的荧光黄银，指示终点到达。

反常塞曼效应 anomalous Zeeman effect 当原子的总自旋和总自旋磁矩不为零时，原子总磁矩 μ_J 绕磁场方向旋进，使原子获得附加的能量 ΔE。

$$\Delta E = M_J g \frac{he}{4\pi m} B = M_J g \mu_B B$$

式中，B 是磁感应强度；M_J 是磁量子数，其值为 J、$J-1$、$J-2$、…、$-J$，共有 $2J+1$ 个可能的取值（J 为内量子数）；μ_B 是玻尔磁子。在无外磁场时，这 $2J+1$ 个能级是简并的，具有总角动量 P_J 所对应的能级，而在外磁场的作用下分裂为 $2J+1$ 个能级。能级分裂间隔的大小，与磁感应强度成正比，都等于 $g\mu_B B$。从同一能级分裂的诸支能级的间隔是相同的，从不同能级分裂出来的各支能级间隔，即使 M_J 值相同，由于角量子数 L 和自旋量子数 S 值不同，使得朗德因子 g 值不同，从而使得 ΔE 值不同，光谱分裂的间隔不等。反常塞曼分裂的谱线，由于上、下能级都不是单一能级，跃迁产生的谱线就不只是三条，出现谱线更复杂的分裂情况。如 Na 588.996nm（$3^2S_{\frac{1}{2}}-3^2P_{\frac{1}{2}}$）反常塞曼分裂产生四条谱线，Na 589.593nm（$3^2S_{\frac{1}{2}}-3^2P_{\frac{3}{2}}$）的反常塞曼分裂产生六条谱线。且由于 ΔE 值不同，光谱分裂的间隔不等。

反常散射 anomalous scattering 在实际原子中，由于电子受原子核束缚，核外电子对 X 射线的散射能力与自由电子有所不同而造成的相位移。在计算原子散射因子时，一般依据下列假定进行：原子是静止的，位于基态，散射频率远大于原子内部转移频率，核外电子密度分布为球形对称，电子的结合能远比 X 射线光子的能量小，电子对 X 射线的散射能力如同自由电子。当考虑反常散射时，原子的散射因子要用复数表示

$$f = f_0 + f' + if''$$

式中，f_0 是无反常散射时的原子散射因子；f'和f''分别是反常散射引起的实部和虚部修正量，它们的数值随着入射 X 射线波长的变化而改变，在吸收限附近，它们的数值最大。利用反常散射可以测定晶体的对称性和晶体的绝对构型；通过多波长技术和同晶置换法相结合，还可以破解相角问题，得到供进一步修正用的初始晶体结构。

反常散射法 anomalous scattering method 用 X 射线衍射法研究晶体结构时，利用原子的反常散射效应测定非中心对称的晶体中手性分子的绝对构型的方法。也包括利用反常散射数据测定重原子的位置，或配合其他方法破解相角问题，测定晶体结构等。

如：根据反常散射的原理，以可调节波长的同步辐射为入射光源，可以利用多波长技术测定晶体结构。因为对于同一个原子而言，反常散射的有无和大小依赖于入射 X 射线的波长，用不同波长的 X 射线作为入射光源收集衍射数据，同一个晶体就相当于多个完全同晶形的晶体，用同晶置换法处理所得的多套衍射数据，就可推得初始的晶体结构。

反冲洗 back wash 在对离子交换剂进行再生之前，由下至上对色谱柱进行水冲洗的操作。

反吹技术 back flushing technique 当需要测定的一些低沸点易挥发组分已从色谱柱流出后，为进行快速分析或避免高沸点组分对色谱柱造成污染而采取用载气反向吹扫色谱柱，使靠近柱入口端处的高沸点组分快速吹出柱外的一种技术。常用于宽沸程复杂样品的气相色谱分析。在实际应用中，常在色谱柱前安装一根预柱，当所需被分析组分从预柱流入色谱柱后，立即将预柱反吹清洗。

反峰 negative peak 又称倒峰、负峰。即与正常出峰方向相反的峰。造成反峰的原因很多，如采用热导检测器检测时，当载气和组分混合物的热导率大于载气的热导率时就会出现反峰。某些操作条件的影响也会引起反峰，如采用氢火焰电离检测器时，由于气流中混入污染物也会出现反峰；热导检测器由于涌浪效应、温度和桥电流过高以及二次热效应等都会引起反峰。

反拉曼散射 inverse Raman scattering; IRS 见逆拉曼效应条。

反离子 counter ion 离子对色谱体系中，离子对试剂所提供的与被测离子带相反电荷的离子。对反离子的要求是它能与被测离子形成稳定的疏水性电中性离子对化合物。例如，对亲水性强的被测阴离子则应选择疏水性强的有机阳离子作反离子。

反（转）门控去耦 inverse gated decoupling 施加辐照脉冲的时间恰恰与门控去耦相反，在观测核的观测脉冲之前，^{1}H 辐照门是关闭的，而观测脉冲之后则是开启的。反转门控去耦的 ^{13}C 谱所获得的是对 ^{1}H 去耦的，但是核欧沃豪斯效应（NOE）受到抑制的谱图，因此每个 ^{13}C 皆为单峰，而其强度则反映了化合物分子内碳核的相对摩尔数，用于定量地确定分子结构。参见门控去耦条。

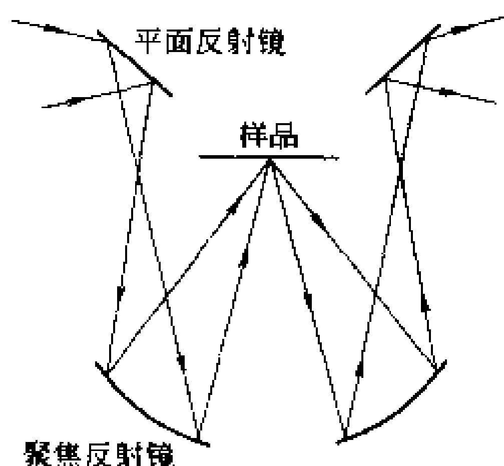
反气相色谱法 inverse gas chromatography; IGC 反气相色谱法是以被测物质（如聚合物样品）作为固定相，将某种已知的挥发性低分子化合物（探针分子）作为样品注入汽化室，汽化后由载气带入色谱柱中，探针分子在气相和聚合物相两相中进行分配，由于聚合物的组成和结构的不同，与探针分子的作用也就不同，选择合适的检测器，检测探针分子在聚合物相中的保留值，借此研究聚合物与探针分子以及聚合物之间的相互作用参数等。在高聚物的研究中得到广泛的应用。气相色谱法的原理和计算公式等均适用于反气相色谱法。

反射定律 reflection law 光投射到两种介质的界面（例如空气-玻璃界面）时，会发生反射。在平滑光洁的界面上，光的反射遵循反射定律：入射光线与反射光线分列界面法线（在入射点与分界面垂直的直线）两侧、入射光线与法线的夹角（入射角）等于反射光线与法线的夹角（反射角），而且入射光线、法线、反射光线三者在同一平面上。

反射光谱 reflection spectra 入射光在样品表面反射所得的光谱。红外光首先经第一块平面反射镜反射到聚焦反射镜，再反射到样品表面，从样品表面反射出来的光，再经聚焦和平面反射镜反射后到达检测器得谱。反射光谱通常在样品的最大吸收处附近有最大反射，而呈现反射光谱。利用反射光谱可以测量晶体的一些光学参数，对不溶性涂层，当被涂金属有足够的反射率时，反射光谱特别适合于金属表面的涂料分析。

反射光栅 reflexion grating 由一组均匀排列，具有精密刻制的等间距等宽度狭缝或反射平面构成的光学元件，能将复合光色散为按波长排列的光谱，这种光学元件称为光栅。前者称为透射光栅，后者称为反射光栅。

反射镜 mirror 用玻璃或金属制成，具有一定面形（平面形或曲面形）可使入射光线发生反射的光学元件。为了提高反射能力，通常在精细抛光过的镜面上镀有高反射能力的反射膜层（在可见光区用铝膜、银膜，在红外区用金膜，等等）。反射镜不但能使光线改变传播方向，也能使光线按要求会聚成像。在分析仪器中最常用的有平面反射镜、凹或凸的球面反射镜，在高性能分光光度计中还用到特殊面形的反射镜（如抛物面镜、柱面镜、椭圆面镜、镯形面镜，等等）。如图。



反射率 reflectivity 反映物质表面对入射光的反射能力的指标，即能将入射光能量反射出去的比例。表面反射率不但与表面内、外两种介质的折射率有关，而且与表面的粗糙度有关，还与光线入射角度、入射光线波长值等等因素有关。为了提高反射率，除了要挑选介质（或膜层）材料、精细抛光表面以外，还得选择适当的入射角和入射光波长。

反射球 Ewald sphere 与倒易点阵相结合，用于诠释晶体衍射方向的虚拟球，又叫爱瓦尔德球。当波长为 λ 的 X 射线照射在晶体上时，若沿 X 射线入射方向通过倒易点阵的原点 o 画一条直线，并在此直线上找一点为球心，以 $1/\lambda$ 为半径画一个与 o 点相交的球，这个球被称为反射球（Ewald 球）。保持 o 点不动，转动晶体，当

倒易点阵点（h, k, l）与反射球面相交时，从反射球心到交点连线的方向就是衍射 hkl 的方向。各种收集衍射数据方法的基本原理，都是依据反射球和倒易点阵的关系而设计的。

反射式高能电子衍射 reflection high energy electron diffraction; RHEED 利用高能电子束作为探束，采用入射电子掠射方式进行的电子衍射。反射式高能电子衍射常配合分子束外延在晶体生长中不断检测结晶的情况，也适于研究一些从表面向体内发展的化学吸附和表面反应，如腐蚀、氧化、碳化等以及一些表面组分从表面至内部有所不同的多组分系统，如材料的硬化、钝化。也是研究材料表面结构的有效方法，尤其是材料的层-层生长。

反射形貌术 reflection topography 应用单色X射线在样品特定的衍射面产生反射而获得样品表面形貌图的X射线形貌术。最主要的实验方法是伯格-巴瑞特法（Berg-Barrat topography），此法的特点是曝光时间短，装置简单，适用于吸收系数大的晶体。例如：很多激光晶体、半导体晶体具有较大的吸收系数，制备适合透射法的样品有一定的困难，因而只能采用反射法研究晶体表面层的完整性。此法在选取辐射和衍射面时，条件较为苛刻，得到的信息也只是表面薄层的完整性，所以不如透射法应用广泛。

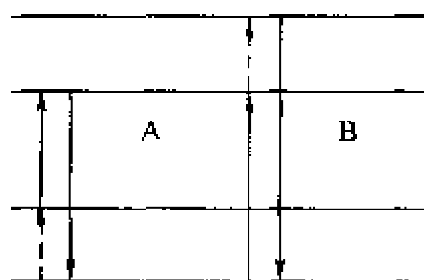
反斯托克斯散射 anti-Stokes scattering 当单色光光子与分子相互作用产生散射现象时，若发生非弹性碰撞，即光子不仅改变了运动方向，且光子与分子之间发生了能量交换，光子从分子的振动或转动得到了能量，从而使光子的频率相应地增加，这种散射现象称为反斯托克斯散射。因为这种散射现象是1928年印度物理学家拉曼（C. V. Raman）首次发现的，故又称之为反斯托克斯拉曼散射。反斯托克斯拉曼散射和斯托克斯拉曼散射一起统称为拉曼散射。

反斯托克斯位移 anti-Stokes shift 一般荧光或拉曼散射的能量要低于（或波长长于）激发光，但如果在吸收光子过程中又附加了热能给激发态分子，则发射的荧光波长或拉曼散射波长有可能比激发波长短，这种荧光发射波长或拉曼散射波长与激发波长的差为负值，称为反斯托克斯位移。在高温的稀薄气体中可能观察到反斯托克斯位移的发射现象。

反斯托克斯荧光 anti-Stokes fluorescence 一般溶液中观察到的荧光发射波长比激发波长长，但如果在吸收光子过程中又附加了热能给激发态分子，则发射的荧光波长有可能比激发波长短，这种荧光称为反斯托克斯荧光，在高温的稀薄气体中可能观察到反斯托克斯荧光。

反斯托克斯原子荧光 anti-Stokes atomic fluorescence 当激发原子的辐射波长与受激原子发射的荧光波长不相同时，产生非共振原子荧光。非共振原子荧光包括直跃线荧光、阶跃线荧光和反斯托克斯荧光。反斯托克斯原子荧光的发生过程如图所示，原子

的吸收波长比原子的荧光波长长。



反斯托克斯荧光
A—起源于亚稳态；B—起源于基态

反铁磁共振 antiferromagnetic resonance 即反铁磁体的电子自旋共振。反铁磁体中方向相反的两类磁矩各自绕容易磁化的轴做拉莫尔进动，但两者稍偏离直线关系。共振频率在微波和远红外线区域内，其值反映了交换作用常数与磁各向异性常数的几何平均值。

反铁磁性 antiferromagnetism 晶体中相邻磁性原子（或离子）的磁矩在负的交换作用下相互反平行地排列，磁矩相互抵消时的磁性称为反铁磁性。具有反铁磁性的物质叫做反铁磁体。当沿着反铁磁体的磁矩方向加上外磁场时，其磁化率比通常的顺磁物质的磁化率还低，随着温度的升高，其磁化率增大，在尼尔（Neel）温度时达到最大。当超过尼尔温度时，反铁磁性磁矩被打乱，变为顺磁性。

反同位素稀释法 inverse isotope dilution method 又称逆向同位素稀释法（reverse isotope dilution me-thod）。将已知量待测元素的稳定同位素载体加到含有放射性同位素的被测试液中，通过同位素稀释测定试液中待测元素（载体）含量的一种方法。其原理是，将放射性试液分为相等的两份，每份含有待测元素量为 W_x，在其中一份溶液中加入已知量为 W_0 待测元素稳定同位素载体，其放射性比度为

$$S_1=\frac{A}{(W_x+W_0)}$$

另一份试液的放射性比度为

$$S_2=\frac{A}{W_x}$$

由此可以求出试液中的待测元素量含量

$$W_x=\frac{S_2}{S_1-S_2}W_0$$

方法的准确度较高，广泛用于标记化合物放化纯度分析、有机分析和活化分析等方面。

反向被动血凝试验 reversed passive hemagglutination; RPH 将特异性的抗体吸附于红细胞上，加入相应的病原菌，使红细胞被动凝集，以达到快速诊断检测的目的。

反向传播算法 back propagation algorithm 又称逆推学习算法，简称BP算法。1986年由 D. E. Rumelhard 和 W. S. McClelland 提出。人工神经网络是一种模仿人脑处理信息的系统，先用样本数据训练神经网络时，它自动地将输出值与期望值进行比较，得到误差信号，再根据误差信号，从后向前调节个神经网络层神经元之间的连接强度，然后再进行运算，使误差减小，再将新的输出值与期望值进行比较，得到新的比先前小的误差信号，再根据较小的误差信号，从后向前重新调节各神经网络层神经元之间的连接强度，依此不断地多次进行，直到误差满足要求为止。

反相高效液相色谱法 reversed phase high performance liquid chromatography; RP-HPLC 由非极性固定相和极性流动相所组成的液相色谱体系。它正好与由极性固定相和弱极性流动相所组成的液相色谱体系（正相色谱）相反。RP-HPLC 的典型的固定相是十八烷基键合硅胶，典型的流动相是甲醇和乙腈。RP-HPLC 是当今液相色谱的最主要的分离模式，几乎可用于所有能溶于极性或弱极性溶剂中的有机物的分离。

反相胶束萃取 reversed phase micelle extraction 胶束萃取是指被萃取物以胶束形式被萃取。如金属或其化合物可以生成疏水性胶体粒子而进入有机相，形成溶胶、胶体溶液或悬浮体从而实现分离。若向非极性溶剂中加入表面活性剂，当表面活性剂浓度超过一定值时，就会在溶剂内形成憎水端向外的表面活性剂聚集体，这种聚集体恰好与在水溶液中形成的胶束相反，因此称为反相微胶团或反相胶束。对于大多数亲水性蛋白质，通过调节水溶液的 pH 值、离子强度等使其选择性地溶解于反相微胶团中从而实现萃取分离，这种方法称为反相胶束萃取。改变实验条件也可以使微胶团中的蛋白质重新返回到水相中。

反相离子对色谱 reversed phase ion pair chromatography 指用适当的反离子与被测离子形成具有一定疏水性的离子对化合物后，采用反相高效液相色谱体系分离所形成的离子对化合物的方法。

反相离子对色谱法 reversed phase ion-pair chromatography 用适当的离子对试剂与被测离子结合生成具有一定疏水性的中性的离子对化合物后，采用反相分配色谱的模式进行分离的离子对色谱方法。大多数的离子对色谱体系为反相分配色谱体系。

反相流动注射分析 reversed FIA 常规的流动注射分析是以向载流中定量注入试样为特征的。反相流动注射分析法则是用试样作载流，以定量注入试剂为特征，又称试剂注入法。由于试剂的扩散系数常常比试样中待测组分的小，因此试剂注入法常常可以得到比试样注入法更高的灵敏度，但当试剂的扩散系数大于待测组分时，试剂注入法的灵敏度反而不如试样注入法。反相流动注射分析法易于实现多组分的连续测定。标准注入法则是反相流动分析的另一类型。

反相毛细管电色谱 reverse capillary electrokinetic chromatography 根据固定相和液体流动相相对极性的差别，毛细管电色谱可分为正相毛细管电色谱和反相毛细管电色谱。当固定相的极性小于流动相的极性时，称为反向毛细管电色谱。

反相三角形 antiphase trigonal 简单耦合体系在相敏相关谱中谱线分裂的强度符合反相三角形规则

n											
n=0						1					
1					1		−1				
2				1		0		−1			
3			1		1		−1		−1		
4		1		2		0		−2		−1	
5	1		3		2		−2		−3		−1

不再符合二项式系数。因此对于 AX_3 体系中的 A 核有 4 条裂分峰，强度比为 1∶ 1∶ －1∶ －1，而 X 核则是两条裂分峰，强度比为 1∶ －1。

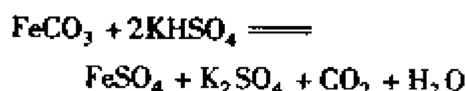
反相柱 reversed phase column 在基质表面键合或包覆非极性有机分子所得到的非极性固定相柱。采用反相柱和极性流动相的液相色谱体系就是应用最广泛的反相高效液相色谱法。常见的反相柱有 C_{18}、C_8 和苯基柱。

反压管 back-pressure tubing 流动注射分析系统的环境温度高于室温时，流路内常会产生气泡，妨碍测量。为此，在系统的排液口连接一段适当长度的细径管，管径通常为 0.25～0.3mm，长度为 3～5m。借此可以增加流路内的压力，抑制气泡的产生。即使液流的温度超过 100℃也不沸腾。

反义核酸 antisense nucleic acid 与细胞内 DNA 或 RNA 序列相互补形成杂交体而阻断或减弱其转录和翻译过程的 DNA 片段或 RNA 片段叫反义核酸。在许多原核细胞中发现存在天然的反义 RNA。反义核酸的上述性质，使其有可能作为药物治疗人类疾病。目前研究较多的反义核酸有反义寡核苷酸（antisense oligode-oxynucleotide，ODN）、反义 RNA 和核酶（ribozyme）。ODN 能与双螺旋 DNA 结合形成三股螺旋或与局部解链的 DNA 单链结合而抑制 DNA 复制和转录。ODN 可以 Watson-Crickk 碱基配对方式与 mRNA 靶序列结合而阻断 mRNA 的加工、成熟、核-浆转移和翻译。采用基因重组技术，在合适的启动子和终止子之间反向插入靶基因，可构建表达反义 RNA 的重组体，在细胞内表达反义 RNA，从而对靶 mRNA 的表达实现抑制作用。

反应层 reaction layer 与电极反应偶联的化学反应仅发生在紧靠电极表面的一薄层溶液中，这层溶液称为反应层，反应层的厚度很小，其值决定于化学反应速率和电活性物质的扩散系数。

反应差热分析法 reaction differential thermal analysis 在差热分析时利用添加物与被测化合物所发生的反应做出检测的方法。例如利用添加物 $KHSO_4$ 来鉴别菱铁矿和高岭土，由于它们在 500～700℃时的差热分析曲线的峰形比较相似，当加入 $KHSO_4$ 后，菱铁矿发生下列反应



$$FeCO_3 + 2KHSO_4 = FeSO_4 + K_2SO_4 + CO_2 + H_2O$$

使菱铁矿的差热分析曲线发生变化，而和高岭土的差热分析曲线有显著的差别。

反应的灵敏性 sensitivity of reaction 定性分析中，用于表示某检出反应对被检出物质的最小量或最小浓度的一种指标，通常用检出限量和限界稀度（最低浓度）来表示。某检出反应的限界稀度是通过逐步降低被检出物质的浓度由试验确定的。例如，以 K_2CrO_4 检出 Pb^{2+} 是基于反应 $CrO_4^{2-} + Pb^{2+} = PbCrO_4\downarrow$（黄色）。先配制一种 1000g 水中含 1g Pb^{2+} 的溶液（浓度是 1∶ 1000），取一滴

（约0.03ml）与一滴 K_2CrO_4 溶液反应，立即生成黄色沉淀；逐级稀释此含 Pb^{2+} 的溶液并进行同样试验，当浓度是1：200000时还能勉强观察到浑浊，再稀释就不再能肯定得出含 Pb^{2+} 的结果了。此时，则将1：200000的浓度称为限界稀度，表示为 $c=1:G=1:200000$，G 为含1g被检出离子的溶剂的克数，由于浓度很低，G 可视为溶液的克数、溶剂（水）或溶液的毫升数。由限界稀度可计算出此反应检出 Pb^{2+} 的检出限量为0.15μg（设检出体积为0.03ml）。显然，G 愈大、检出限量愈小，反应愈灵敏。

反应的特效性 specificity of reaction 在大多数情况下，同一种试剂能同时与试样中的多种组分反应，生成具有相似性质的物质，在检出或测定某种组分时，其他共存组分就有干扰。极少数情况下，一种试剂仅能与一种组分发生有特征现象的反应，而其他共存组分没有干扰，从而可从试样中直接检出或测定这种组分。这种反应称为特效反应，所用试剂称为特效试剂。例如，用NaOH作试剂可直接从溶液中检出 NH_4^+；用 $K_4Fe(CN)_6$（亚铁氰化钾）作试剂可直接从溶液中检出 Fe^{3+} 都为特效反应。目前已知的特效反应为数不多，分析中常采用的是一种能和少数几种组分反应生成类似现象的试剂，这种试剂称为选择性试剂，这种反应称为选择性反应。

反应的选择性 selectivity of reaction 是指用于测定某种组分的某个反应对其他共存组分的抗干扰能力。在大多数情况下，同一种试剂能同时与试样中的多种组分反应，生成具有相似性质的物质，在检出或测定某种组分时，其他共存组分就有干扰。当某测定反应允许的共存组分的种类和量愈多，该反应的选择性就愈好；反之，则称该反应的选择性不好。实际工作中，常以在一定的误差（如±5%）要求下，对不同共存组分的容许量来表示反应的选择性。

反应气相色谱法 reaction gas chromatography 根据分析目的需要先将样品在反应区进行相应的化学反应，再由载气将反应后的样品带入色谱柱和检测器或直接进入检测器进行检测，依据得到的谱图进行定性和定量分析。反应区可置于色谱柱前（柱前衍生）、柱内、柱后衍生。化学反应的目的是使样品的分离和检定变得容易或成为可能。反应方式有氢化、脱氢或氢解反应、催化反应、热解反应、有选择地消除反应等。

反应色谱 reaction chromatography 在色谱分离过程中或在分离前后有意识地使被测物发生某种化学反应，实现定性或组成分析目的的色谱方法。反应色谱技术可以用在各种色谱模式中，但主要是用在气相色谱、二维薄层色谱和裂解气相色谱中。

反圆心式展开 anti-circular development 在色谱纸或薄层色谱中，将样品点在薄层板或纸的周围，展开剂向着圆心的方向展开，称这种方法为反圆心式展开。此方法展开速度快，

对 R_f 值较大的组分可提高其检测的灵敏度和定量的准确性。

反转电渗流 reverse electroendosmotic flow 在毛细管电泳中，缓冲溶液中若无阳离子表面活性剂时，正常的电渗流朝向阴极。当缓冲溶液中的阳离子表面活性剂浓度到一定程度时，由于疏水的非极性链之间互相作用形成双分子结构，产生正电荷表面而导致电渗流反向。这一现象称为反转电渗流。

反转（反向）实验 INVERSE experiment 通过极化转移或多量子相干或多量子滤波，由^1H间接地检测天然丰度低和低磁旋比的自旋核（核X）的技术。本实验所用的探头与常规$^1H/^{13}C$探头不同，^1H线圈在里层，而^{13}C线圈在外层，以避免^1H检测反转实验中灵敏度的损失，由此而得“INVERSE”名。异核化学位移相关的 H-C COSY、长程^1H-^{13}C COSY，远程耦合异核相关 COLOC 等实验均对^{13}C进行观测和采集 FID 信号。“反向”方式，则是观测^1H，由于检测信号强度正比于$\gamma^{3/2}$等，因此灵敏度大为提高。反转实验主要有检出^1H的异核单量子相干（HSQC），检出^1H的异核多量子相干（HMQC），^1H核检测的异核多键相关（HMBC）等实验。

反转恢复法 inversion recovery 对于在外磁场中处于平衡的自旋体系施加 π 脉冲，使 z 方向磁化强度反转，相当于是把上、下能级的自旋布居数突然反转。因为存在纵向弛豫过程，将使体系恢复到热平衡状态。在发生反转之后，会产生发射跃迁；随着时间的延长，发射跃迁信号逐渐减弱，在某一时刻，上、下能级的自旋布居数相等，在这瞬间将检测不到信号，相当于发生了饱和；此后，就从发射跃迁转为吸收，直至恢复到正常的吸收信号。在此过程中，用不干扰自旋分布的连续波或检测脉冲来监测信号的恢复过程，通过分析信号强度的变化曲线，就可测出纵向弛豫时间。然而在常用的仪器中并不是直接检测纵向磁化强度的变化，而是采用 $180°-\tau-90°-T-$（检测）脉冲序列，固定时间 T，改变延迟时间 τ 进行测量。

反转恢复自旋回波 Inversion Recovery Spin Echo; IRSE 测定自旋晶格弛豫时间 T_1 的一种方法。由反转恢复和数次自旋回波两部分脉冲序列联合而成：$\pi-\tau_1-\left(\frac{\pi}{2}\right)-\tau_2-\pi-\tau_2-$采集 FID。利用此脉冲序列可以测量大分子（如蛋白质分子）溶液中小分子的自旋晶格弛豫时间 T_1 值。由于蛋白质等大分子共振谱线之 T_2 极短，在 $2\tau_2$ 时期内可衰减到零，从而消除了对小分子 T_1 测量的干扰，而小分子共振线有较长的 T_2，信号衰减较少，在回波信号中得到保留而被检测。测得不同 τ_1 下回波顶（极大）的磁化矢量大小 M，作 $\ln\left(1-\frac{M}{M_0}\right)$-$\tau_1$ 图，由直线斜率可求出 T_1。IRSE 提供了一种利用不同弛豫时间提高分辨率的方法。

反转回复法 Inversion Recovery method 简称 IR 法。是 PFT-NMR 测量 T_1 的一种方法。使用脉冲序列为 $\pi-\tau$（变数）$-\frac{\pi}{2}-$ 采集 FID $-t_R$（$\geq 5T_1$）。对其中被研究的核素施加 π 脉冲（即 180° 脉冲）后，磁化强度 M_0 转到 $-z'$ 轴。这时纵向磁化将由负值逐渐恢复到原始正值。若经过比较短的 τ 时间，再施以 $\frac{\pi}{2}$ 脉冲，磁化强度将转到 $-y'$ 轴，随即采集 FID，傅里叶变换后得到一负信号。相继改变 τ 值，逐渐增长，若磁化强度恰好恢复到 $M_z=0$，则测得零信号，若 τ 值较长，则 M_z 恢复为正值，在 $+z'$ 轴上。这样连续用 $\frac{\pi}{2}$ 脉冲作用并采集 FID，经傅里叶变换后，便可得到一系列 τ 值下 $M_z(\tau)$ 的变化曲线。满足 $M_z(\tau)=M_0(1-2e^{-\frac{\tau}{T_1}})$，当 $M_z(\tau)=0$ 时，$\tau=0.693T_1$，或者将 $\ln\left[\frac{M_0-M_z(\tau)}{M_0}\right]$ 对 τ 作图应呈直线，其斜率为 $-\frac{1}{T_1}$。这是常用的比较精确的测量自旋-晶格弛豫时间 T_1 的方法。

返滴定 back-titration 亦称回滴。当一滴定反应进行得很慢，或因其他原因得不到敏锐的滴定终点时采用的一种容量滴定法。此时，将一定的，但又过量的标准试剂（通常是滴定剂）加入到样品溶液中，待反应完成后，用另一标准溶液再滴定上述过量、未反应的标准试剂。根据加入的标准试剂的量和滴定时消耗的标准溶液的量，即可求得样品溶液中被测物质的量。

泛频谱带 overtone band 又称倍频谱带。物质吸光后由振动量子数 $\nu=0$ 的振动基态跃迁到 $\nu=1$ 产生的吸收谱带称为基本谱带或基频。由于位能函数的非谐振性，由 $\nu=0$ 到 $\nu=2$、3，…的跃迁也可发生，所产生的吸收谱带分别称为第一、第二、第三泛频谱带。泛频谱带的频率不正好等于基频频率 ν_0 的整数倍，当非谐振常数为负时，此时第一泛频谱带的频率要 $<2\nu_0$，非谐常数为正时，第一泛频谱带的频率要 $>2\nu_0$。泛频强度一般比基频强度弱一个数量级。

范第姆特方程式 Van Deemter equation 荷兰的范第姆特（Van Deemter）等人在 1956 年推导出一个针对填充柱的柱效与载气流速、柱中的纵向扩散和传质阻力等动力学因素相关联的方程式，即速率理论方程式

$$h=2\lambda d_f+\frac{2\gamma D_g}{u}+\frac{2k'}{3\ (1+k')^2}\frac{d_f^2}{D_l}u+\frac{0.01k'}{(1+k')^2}\frac{d_p^2}{D_g}u$$

式中，h 为理论塔板高度；λ 为和填充柱填充均匀性有关的常数；d_p 为填充物的平均颗粒直径；γ 是与载体填充情况有关的常数；k' 为容量因子；u 为载气线速；d_f 为固定液液膜厚度；D_l 为组分在液相中的扩散系数；D_g 为组分在气相中的扩散系数。第一项称涡流扩散项，第二项称分子

扩散项，第三项称液相传质项，第四项称气相传质项。范第姆特方程反映了载气性质、流速、粒度大小及分布、色谱柱填充好坏、固定液性质、用量及涂渍情况等因素对柱效的影响。

方波伏安法 square wave voltammetry; SQWV 将一个低频率小振幅（一般≤50mV）的方形波电压叠加在电解池工作电极的外加直流电压上面，并在方波电压改变方向前的瞬间记录电解池的特定的交变电流成分与相应的直流电位关系的方法。方波伏安法的优点是它能消除或者减少双电层充电电流的影响，信噪比高，在适宜的条件下，测定的最低浓度可达 $10^{-7}\ mol\cdot L^{-1}$，是目前电化学分析法中测定灵敏度比较高的方法之一。

方波激发脉冲 square pulse for excitation FT-NMR 实验必用的脉冲，经傅里叶变换表现为一个强度随频率变化的连续谱，呈 sinc 函数的形式。其中心频率为射频频率 f_1，在 f_1 附近有一个平坦区，两侧强度随频率偏离 f_1 迅速下降。为了在谱宽范围内能得到等强度的激发，必须有一个较宽的平坦区，且要求脉冲宽度 t_p 尽可能地小。为使自旋系统达到一定的翻转角 $\theta=\gamma \boldsymbol{B}_1 t_p$。常用的脉冲宽度 t_p 越小，要求脉冲强度 $\boldsymbol{B}_1$ 越大。常规测量时用 90° 脉冲，使被测核磁强度 $\boldsymbol{M}_0$ 从 z 轴旋转到 xy 平面内，接收到最大 FID 信号。用单方波脉冲激发实际上是用一个等强度的连续频率谱去辐照自旋系统。

方差 variance 单次测量值 x_i 与测量平均值 $\bar{x}$ 的偏差的平方的统计平均值，表征一组测定值离散性的一个特征参数。以 S^2 表示

$$S^2=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}$$

其方根值 S，称为标准偏差。其特点是全部测定值都参与方差的计算，充分利用了所得到的信息；当一组测定量值中出现离散性大的测定值时，方差随即明显变大，反应非常灵敏；具有加和性，总的方差等于各个因素引起的方差之和；样本方差是总体方差的无偏估计值，用方差量度精密度是最有效的。方差在数据统计处理中有广泛的应用。

方差的柯克伦检验 Cochran's test for variance 一种检验多个总体方差一致性的统计检验方法，检验统计量是

$$C=\frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^{m}S_i^2}$$

式中，S_{max}^2 是 m 组方差 S_i^2（$i=1,2,\cdots,m$）中最大的方差。当计算的统计量值 C 大于柯克伦检验表中约定显著性水平 α 和自由度 $f=n-1$ 时的临界值 $C_{\alpha,f}$，表明 S_{max}^2 与其他的方差 S_i^2 之间有显著性差异。此检验法只适用于各方差测定次数 n 相同的场合。

方差分析 analysis of variance 一种基于方差加合性和自由度加和性原理，处理受多因素影响的测量数据的

数理统计方法。当测量受到多种因素的影响，致使各测量值 x_i 之间产生差异，此种差异可用偏差平方和 $Q=\sum(x_i-\bar{x})^2$ 来量度，总的偏差平方和等于各种因素所形成的偏差平方和的加和。在对总偏差平方和分解的基础上，分别求出各因素效应、因素间交互效应和误差效应形成的偏差平方和及其相应的方差估计值，在一定显著性水平 α 下将交互效应、因素效应对误差效应的方差比进行 F 检验，若方差比 F 值大于该显著性水平 α 下的临界值 F_α，则判定交互效应和因素效应是显著的；否则为非显著性的。通过方差分析可以了解和确定各因素对测定结果是否有显著性影响、各因素影响的相对大小及各因素间的相互效应，从而为优选和有针对性的控制试验条件提供科学依据。方差分析在分析数据处理中有着广泛的应用。

方差分析表 table of variance analysis 表示方差分析结果的一种表格。表中通常列出方差来源、偏差平方和、自由度、方差估计值、方差比、统计量 F 临界值和显著性标志符号，有时还列出方差组成。用它来表示方差分析结果简单明了。

方差估计值 estimator of variance 由样本测量值计算的方差，记为 S^2。样本方差 S^2 是总体方差 σ^2 的无偏估计值，并以 σ^2 为其期望值。它表征测量的精密度。

方差加和性 additivity of variance 总方差等于各部分方差之和。它是进行方差分析和估计各因素对测试结果影响相对大小程度的基础。参见**方差分析**条。

方法标准 method standard 以试验、检查、分析、抽样、统计、计算、测定、作业等各种方法为对象制订的标准。

方法误差 methodic error 由于测试方法本身不完善、使用近似的经验公式、或试验条件不完全满足应用理论公式所要求的条件、基体或其他共存组分的干扰等引起的误差。在进行不同测试方法比对时，不同方法之间的差异也将产生误差。

方向聚焦 direction focusing 将运动能量相同的离子束从离子源加速引出时，实际上不可能所有离子都正好完全垂直入射到均匀的横向磁场中，总会有一个小的发散角，这个发散角使得同一质荷比的离子束，在穿越磁场的过程中被展宽。但是，磁场对发散角引起的离子束发散有一定约束作用。在一定条件下，离子束在磁场中偏转一定角度后，会重新会聚在一处。磁场的这种聚焦作用称为方向聚焦。

防腐剂 preservatives 抑制微生物的生长或杀灭这些微生物，以防止各种加工食品、水果和蔬菜等腐败变质的物质。可以根据具体情况使用物理和化学方法来防腐。防腐剂可分为广义和狭义两种：狭义的防腐剂主要指山梨酸、苯甲酸等直接加入食品的化学物质；广义的防腐剂除包括狭义的防腐剂所指的化学物质外，还包括那些通常认为是调料而具有防腐作用

的物质，如食盐、醋等，以及通常不加入食品，而在食品储存过程中使用的消毒剂等。

仿生传感器 biomimic electrode 利用生物分子特性如高识别性、高催化性等构置的电极。

仿生模拟识别 biomimetic recognition 人为地模拟生物体系中的天然识别过程，设计合成或寻找人工替代品作为识别的受体，研究生物分子识别及其传感的方法称为仿生模拟识别。由于天然资源有限，生物酶等易于失活变性，稳定性差，因此长期以来仿生模拟识别是化学家、生物学家等的重要研究课题。

纺织品有害物质检测 determination of harmful substances in textiles 指纺织品中甲醛、禁用偶氮染料、重金属残留物、农药（杀虫剂和除草剂）残留物、防腐剂、多氯联苯等生态毒性物质含量的检测。它是涉及人体卫生、健康和环保的重要检验项目。

纺织品pH值的检测 determination of pH in textiles 人类皮肤表层一般呈弱酸性，可防止疾病的入侵。因此纺织品的pH值控制在中性和弱酸性对人体有益。我国颁布的检测方法标准为GB 7573—87《纺织品 水萃取液pH值的测定》。国外的检测方法标准有美国的AATCC 81。

纺织品中甲醛的检测 determination of formaldehyde in textiles 甲醛是印染后整理过程中被引入并留在纺织品上的残留物之一。残留甲醛的纺织品在穿着使用过程中会逐渐释放游离甲醛，对呼吸道黏膜和皮肤产生刺激，引发疾病。我国颁布的检测方法标准为GB/T 2912.1—1998《纺织品 甲醛的测定 第一部分：游离水解的甲醛（水萃取法）》、GB/T 29122—1998《纺织品 甲醛的测定 第二部分：释放甲醛（蒸汽吸收法）》。国外的检测方法标准有日本的JISL 1041、美国的AATCC 112等。

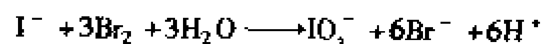
纺织品中禁用偶氮染料的检测 determination of azo forbidden dyestuff in textiles 纺织品中某些偶氮染料在还原条件下会产生致癌芳香胺类化合物，德国等发达国家已立法禁止含有22种芳香胺中间体染料的纺织品或日用消费品的销售。我国颁布的检测方法系列标准为GB/T 17592.1—1998《禁用偶氮染料检测方法 气相色谱/质谱法》、GB/T 7592.2—1998《禁用偶氮染料检测方法 高效液相色谱法》和GB/T 17592.3《禁用偶氮染料检测方法 薄层层析法》。

纺织品中可溶性重金属残留物的检测 determination of soluble heavy metals hangover in textiles 纺织品中的重金属As、Cd、Cr、Co、Cu、Pb、Hg、Zn、Ni、Sb来源于天然纤维的重金属残留和在印染加工中的金属络合染料及助剂。可溶性金属被人体吸收后在体内积蓄，对人体造成损害，特别对儿童的危害更大。我国已颁布的检测方法标准为GB/T 17593—1998《纺织品 重金属离子检测方

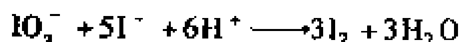
法 原子吸收分光光度法》。

放大倍数 magnification 扫描电镜的放大倍数是指其图像的线形放大倍数，以 M 表示。如果样品上长度 L_s 直线上的信息，在显像管上成像在 L_c 长度上，则放大倍数为：$M = \frac{L_c}{L_s}$。扫描电镜的有效放大倍数与电子束的直径有关。如果样品上电子束编址的单位区域，即像素，小于电子束直径，每次取样传送的信息包含一个以上的像素，前后传送的信息部分互相重叠，这样的放大倍数称为虚伪放大倍数。

放大效应 multiplication effect 亦称倍增效应。利用多个化学反应及其化学计量关系直接或间接地增大被测组分表观存在量，以实现微量物质准确测定的方法。例如，为用滴定法测定微量 I^-，先用 Br_2 水使其氧化为 IO_3^-，煮沸除去过量的 Br_2 后加入 KI 并酸化，则因反应



$$I^- + 3Br_2 + 3H_2O \longrightarrow IO_3^- + 6Br^- + 6H^+$$



$$IO_3^- + 5I^- + 6H^+ \longrightarrow 3I_2 + 3H_2O$$



$$I_2 + 2S_2O_3^{2-} \longrightarrow S_4O_6^{2-} + 2I^-$$

使 1mol I^- 变为 3mol I_2，用 $Na_2S_2O_3$ 滴定，将消耗 6mol 的 $Na_2S_2O_3$；若析出的 I_2 用 CCl_4 萃取后，再反萃至水相，重复用 Br_2 氧化为 IO_3^-，再加 KI 并酸化，并用 $Na_2S_2O_3$ 滴定析出的 I_2，将消耗 36mol 的 $Na_2S_2O_3$，即放大了 36 倍。进而还可放大 216 倍。从而可利用滴定法测定微量 I^-。

放电电离 discharge ionization 一种利用放电现象（如电弧、辉光、火花、电晕等）进行离子化的方法。

放热峰 exothermic peak 在差热分析中，当试样有放热变化发生时，试样温度高于参比物温度即 ΔT 为正值时所形成的差热曲线峰。

放射分析法 radioactive analysis 用一种放射性物质与非放射性物质发生某种化学反应，通过测量放射性对非放射性物质进行定量分析的方法。包括放射性滴定法、放射性释放法、放射性示踪法、同位素稀释法等。

放射分析化学 radioanalytical chemistry 又称核分析化学。通过测定放射性核素发出的特征射线进行定性定量分析的一门分支学科。所用的方法分为两类：（1）放射性同位素作指示剂的方法，包括放射分析法、放射化学分析、同位素稀释法等；（2）以适当种类和能量的粒子轰击样品，探测样品中放出的各种特征辐射的性质和强度的方法，包括活化分析、粒子激发 X 射线荧光分析、穆斯堡尔谱等。研究内容包括锕系元素分析、裂变产物分析、环境放射性核素分析、产额和燃耗分析、放射性示踪分析等。其特点是灵敏度高，特效性强，基体效应小，用样量少，方法简便，有时可以不破坏样品。

放射化学 radiochemistry 研究放射性物质及与原子核转变过程有关的化学问题的化学分支学科。主要研究放射性元素化学，放射性核素的制备、分离、纯化、鉴定，它们在极低浓度时的化学状态和行为，核转变产

物的性质及放射性核素的应用等。放射化学的特点是：研究对象都具有放射性、不恒定性，研究对象的组成随放射性衰变而不断变化。

放射化学纯度 radiochemical purity 简称放化纯度。以某种特定化学形态存在的放射性核素的放射性活度在样品总放射性活度中所占的百分数，是表示放射性样品纯度的一个量。对于放射性标记的复杂有机化合物，放化纯度还应包括特定的标记位置和旋光构型。

放射化学分离 radiochemical separation 用化学或物理化学方法将稳定物质与放射性物质分离，或将几种放射性物质之间彼此分离的技术。常用的放化分离方法有共沉淀法、溶剂萃取法、离子交换色谱法、电化学分离法、挥发法、蒸馏法、核反冲法等。其特点是，带有放射性，需在特殊的防护条件下进行操作；放射性物质不断进行衰变，有些放射性物质的半衰期很短，要求快速分离；被分离的物质的量或浓度很低，通常要使用载体；存在辐射效应等。它广泛地用于核燃料生产和后处理、放射性核素生产、放射性标记化合物制备、核化学研究和核分析化学中。

放射化学分析 radiochemical analysis 用适当方法分离和纯化样品后，通过测量放射性活度来确定样品中所含放射性物质数量的方法。如通过测量放射性核素^{40}K 的放射性求得钾的含量。

放射化学中子活化分析 radiochemical neutron activation analysis; RNAA 又称破坏性中子活化分析。是一种中子活化分析技术。样品经中子流辐照后，先用放射化学方法对样品进行处理，将被测定的放射性核素分离富集出来，测量其放射性活度和半衰期，再对它进行定性和定量分析。参见**中子活化分析**条。

放射量热法 thermoradiometry 一种利用量热计测量放射性活度的方法。放射性物质的射线能量被其他物质吸收后转变为热能，从而使吸收物质温度升高，用量热计测量放射性物质的输出功率 W 和由放射性核素一次衰变放出的平均能量 $\bar{E}$，可以求得放射性活度 A。

$$A = \frac{1.6874 \times 10^2 W}{\bar{E}}$$

A 的单位为居里（Ci），换算为法定单位，$1\text{Ci} = 3.7 \times 10^{10}\text{Bq}$。

放射免疫测定仪 radioimmunoassay instrument 用于体外竞争性放射免疫分析的设备。放射免疫测定法的特点是不将放射性物质引入人体，而是将放射性核素示踪技术与免疫学方法相结合在体外进行检测。放射免疫测定仪由闪烁探头、放大器、脉冲高度分析器、定标器/定时器、打印机、数据处理机、样品输送控制器、计数次序程序控制器及高低压电源组成。目前较普遍使用的主要有井型闪烁计数器和 γ 免疫计数器两种。

放射免疫分析 radioimmunoassay; RIA 又称为竞争性放射饱和分析

法。是一种以放射性同位素标记抗原和样品中未标记抗原与不足量抗体之间特异性竞争结合反应为基础的微量分析技术。1959 年由美国学者贝尔森（S. A. Berson）和耶洛（R. S. Yalow）提出，由于耶洛在发展放射免疫分析技术方面的杰出贡献，获得了 1977 年诺贝尔生理学和医学奖。放射性标记抗原 A_g^* 与未标记抗原 A_g（待测抗原）具有相同的免疫活性，与不足量的抗体 A_b 发生竞争结合反应，分别生成 A_g^*-A_b 和 A_g-A_b 复合物，当 A_g^* 和 A_b 为恒量时，加入的 A_g 多，生成 A_g-A_b 多，游离的 A_g^* 就多，达到平衡后，分离出来的复合物中的放射性活度减弱，而留在抗原分离物内的放射性活度就大，即复合物的放射性活度与 A_g 量成反比。测量了分离出来的复合物中的放射性活度就可以计算出 A_g 量。它将同位素分析的灵敏性和抗原抗体反应的特异性结合起来，优点是灵敏度高，可测出纳克到皮克含量的物质，这是其他生物测定法所无法比拟的；特异性强；精确性好；样品用量少；测定方法易规范化和自动化。缺点是需要特殊的仪器设备和一定的防护条件，某些同位素标记物的半衰期较短实验废物难以处理，对环境造成放射性污染。可用来检测药物中毒和代谢，分析多肽、蛋白、肿瘤相关物质，研究激素的生理和药理作用等，在医学、药物和生物学中有着广泛的应用。

放射免疫分析试剂盒 radioimmunoassay kit 由非标记抗原（标准品）、放射性同位素标记抗原、特异性抗体和分离剂及操作说明书等组合而成的专门用于放射免疫分析的试剂盒。广泛用于生物医学、病理和药理研究、临床诊断等领域。

放射免疫火箭电泳自显影法 radioimmuno-rocketphoresis autography 一种建立在火箭电泳基础上的免疫沉淀放射自显影术。将溶解于 1% 琼脂内的适当浓度的抗体制成平板，在其一端打一排小孔，加入一定量的标记抗原和血清，在电场作用下，血清抗原和标记抗原一同在沿琼脂板泳动的过程中，不断与抗体形成复合物，沉淀在琼脂板上，形成似火箭状的沉淀峰。洗去板上游离物，干燥后，将板与 X 射线胶片紧密地贴在一起，射线使胶片感光形成潜影，经显影和定影后，得到火箭状的黑像，与标准火箭峰高度相比，可以确定血清样品中的抗原含量。方法简便，特异性强，但检测时间长。

放射热分析 emanation thermal analysis；ETA 在程序控制温度下，测量物质释放出的放射性物与温度的关系的一种技术。该法通常在所研究的试样中加入具有较高检测灵敏度的放射性惰性气体，通过试样逸出的放射性气体速率的变化，可间接反映出与试样表面积变化或气体扩散条件有关的所有过程，如固相反应、热分解、相转变、晶型变化、烧结等。目前，已广泛应用于固态化学、催化剂、陶瓷材料、高聚物、粉末冶金等领域。例如，H_2 和 O_2 的混合气体在

用[222]Rn标记的铂箔上的催化反应。研究结果表明：当在铂箔上进行第一阶段的催化反应时，Rn的释放速率是增大的，这是由于催化剂铂箔表面上化学吸附的H_2和O_2发生氧化还原反应引起的。

放射性 radioactivity 不稳定核素自发放出α、β、γ射线或粒子的现象。放射性现象是法国物理学家贝可勒尔（A. H. Becquerel）于1896年首先发现的。天然存在的放射性同位素自发放出射线的特性，称为天然放射性；通过核反应人工制造的放射性同位素自发放出射线的特性，称为人工放射性。放射性现象是由原子核内部变化引起的，与核外电子状态的改变关系很小，研究放射性现象是了解原子核的重要手段之一。

放射性标记方法 radiolabelling method 用易于检测的放射性核素给某种化合物分子打上“记号”的方法。标记的方法有化学合成法、生物化学法、同位素交换法、辐射合成法和热原子反冲标记法等，常用的是前三种方法。化学合成法是制备^{13}H、^{14}C、^{32}P、^{35}S和^{125}I等核素标记化合物最有效的方法，优点是能控制标记原子在被标记分子中的位置、产品的纯度和比活度，但不能得到纯光学异构体，不适合于标记生物大分子。生物化学法是制备^{14}C、^{32}P、^{35}S高比放射性活度、高产额并能保持天然构型的标记化合物的重要方法。同位素交换法适用于标记^{13}H、^{35}S、和^{125}I，优点是操作简便，适宜于制备天然化合物或结构复杂的药物标记化合物，缺点是标记位置不可预知，放射性比活度低，产品纯化困难和核素利用率低。

放射性标记化合物 radio-labelled compound 用放射性核素取代化合物分子的一种或几种原子使之能被识别、并能用作示踪剂的化合物。它与未标记化合物具有相同的化学和生物性质，并可利用其放射性进行追踪。常用的标记方法有化学合成法、生物化学法、同位素交换法。标记化合物用途非常广泛，如在医学上用于疾病诊断、病理研究、脏器显像、功能检查、免疫分析等方面，在环境科学方面研究微量元素在环境中的迁移转化，在农业上研究植物生理、肥效、农药残毒、光合作用等，在工业上研究金属腐蚀、机械磨损、管道检漏等，在水文水利领域研究港口海湾底沙的分布和运动、水库检漏、流量测定等，在基础科学中研究化学反应机理、新陈代谢、细胞分裂等。

放射性标准溶液 radioactive standard solution 能满足一定物理化学性质要求、其放射性比活度已准确测定过的用作放射性标准的溶液。其浓度一般以质量浓度$Bq \cdot g^{-1}$（溶液）表示，并给出不确定度。放射性标准溶液要求纯度高，均匀，比活度值定值准确。

放射性滴定 radiometric titration 一种以放射性化合物为滴定剂或被滴定液，根据滴定过程中溶液放射性活度对滴定体积变化的转折点确定滴定终

点的容量分析方法。沉淀滴定法最适合于放射性滴定，因为在滴定过程中能同时进行分离，典型的实例是用放射性$^{110}Ag^+$标准溶液滴定Cl^-。放射性滴定也用于络合滴定与氧化还原滴定。该方法灵敏度比常规滴定法高。

放射性电离检测器 radio ionization detector 利用电离室中放射源特定射线的作用，使被测物质通过电离室，产生离子流的变化而进行检测的一类检测器的总称，包括电子俘获检测器、氦电离检测器、氩电离检测器、电离截面检测器、电子迁移率检测器等。

放射性防护 radioactive protection 避免或减弱放射性物质及其辐射伤害人体或其他对象的措施。放射性物质对人体的损害，一是它进入人体内引起的生物化学毒性，二是辐射体内、外照射引起的损伤。内照射防护主要是采取措施隔断放射性物质进入人体的各种途径，外照射防护主要是缩短受照射时间，尽量远离辐射源和采取屏蔽措施。

放射性活度 activity 放射性核素的衰变率。在 dt 时间间隔内，一定量放射性核素发生的核衰变数为 dN，则放射性活度 $A=\frac{dN}{dt}=\lambda N$，式中 N 是 t 时刻该放射性核素的原子核数目，λ 是该放射性核素的衰变常数。它的单位是贝可（Bq），1 Bq = 1 裂变 · s^{-1}。

放射性监测 radioactivity monitoring 放射性监测的任务是对某地区环境（或个人）中放射性污染物量、空间照射量、可电离辐射剂量作定期或连续的测定。测定的主要对象是 α 射线、β 射线、γ 射线和中子等。由于环境样品中放射性物质含量一般较低，用通常的滴定分析，甚至比色法都无法测定，应当用较灵敏的仪器法。在环境监测中常用的放射性探测仪器有气体探测器、固体探测器和感光探测器。

放射性检测器 radioactivity detector 采用闪烁技术连续监测流动相 β 射线，用以检测放射性元素标记样品的检测器。检测器中装有一个闪烁器，其中充填有闪烁物质（如氟化钙、蒽、芪、二苯芪等）。当流动相中的放射性溶质与闪烁物质接触时，由于 β 射线的作用，闪烁物质产生光脉冲，用光电倍增管接受，获得的电信号与样品浓度成正比。

放射性平均寿命 average life of radioactive atom 一种放射性核素所有原子存活寿命的平均值。平均寿命与衰变常数 λ、半衰期 $T_{\frac{1}{2}}$ 的关系是

$$\tau=\frac{1}{\lambda}=1.443T_{\frac{1}{2}}$$

放射性释放法 activity release method 一种放射化学分析方法。用放射性化学试剂与样品反应，“释放”出一种放射性产物，一般是放射性气体，通过测量释放出来的放射性物质的活度，计算试样中被测物质含量。如用放射性^{14}CO与空气中 OH 在聚四氟乙烯容器内反应，生成放射性$^{14}CO_2$与 H，用冷冻法将$^{14}CO_2$从混合物中分离出来，测量其放射性，计

算出空气中的 OH 含量。

放射性寿命 radioactive life 放射性核素存活时间的长短。每一种放射性核素具有特征寿命，常用半衰期 $T_{\frac{1}{2}}$ 和平均寿命 τ 表示。半衰期是放射性核素在衰变过程中放射性活度衰变到其初始活度一半所经历的时间。平均寿命是一种放射性核素所有原子存活寿命的平均值。

放射性衰变 radioactive decay 简称衰变。放射性核素放射出辐射后转变为其他核素或同一种核素的不同能态的变化。最常见的衰变类型是 α 和 β^- 衰变，前者是由原子核中放出一个氦原子核，后者是由原子核中放出一个电子。放射性原子核衰变服从统计规律：

$$A = A_0 e^{-\lambda t}$$

式中，A_0 和 A 分别是起始时刻和 t 时刻的放射性活度；λ 是衰变常数。放射性原子核的数目随时间呈指数减少。放射性原子核衰变方式有 α 衰变、β^- 衰变、β^+ 衰变、电子俘获衰变、同质异能跃迁衰变、中子衰变、质子衰变、自发裂变等。一种放射性核还可以两种或多种不同的衰变方式按一定比例进行衰变。

放射性衰变常数 radioactive decay constant 单位时间内放射性核素发生自发衰变的几率，是放射性核素的重要特征之一。放射性衰变是统计性的，若在 t 时刻放射性核素数为 N，在 dt 时间内发生自发衰变的数目为 dN，则衰变常数

$$\lambda = -\frac{1}{N}\frac{dN}{dt}$$

λ 的量纲是 s^{-1}。λ 与半衰期 $T_{1/2}$ 的关系是 $\lambda = \frac{0.693}{T_{1/2}}$。$\lambda$ 值大的放射性核素衰变得快、λ 值小的放射性核素衰变得慢。

放射性同位素 radioisotope 同一放射性元素中具有不同质量数的一些原子品种。英国放射化学家索迪（F. Soddy）根据无法用化学分离手段分开的元素可以排列在周期表同一位置的事例，1910 年首先提出了放射性同位素的概念。

放射性同位素示踪法 radioisotope tracer method 用放射性同位素或其标记化合物，通过测量放射性指示和追踪与其相应的元素或化合物的化学反应机理、药物代谢过程、物质在环境中的迁移转化规律等的方法。该法灵敏度高，可测定 $10^{-14} \sim 10^{-18}$ g 的微量物质，适合于在生理条件下进行试验且能定位，在生物合成、药物代谢、分子杂交、病理研究、基因工程以及其他科学研究中都有广泛的应用。

放射性污染监测 radioactive contamination monitoring 人类活动排放出的放射性污染物，使环境的放射性水平高于天然本底或超过国家规定的标准。放射性污染物是指各种放射性核素，它与一般的化学污染物有显著区别，即放射性污染物的放射性与其化学状态无关。每一种放射性核素都有一定的半衰期，能放射具有一定能

量的射线。放射性核素排入环境中后，可造成对大气、水体和土壤的污染，由于大气扩散和水流输送可在自然界得到稀释和迁移。放射性核素可被生物富集，使某些动物、植物，特别是一些水生生物体内放射性核素的浓度比环境中的增高许多倍。放射性污染监测就是对环境中放射性核素的浓度、种类和变化情况等进行监测。

放射性元素 radioactive elements 其所有同位素都具有放射性的元素。分天然放射性元素和人工放射性元素。天然放射性元素是指最初从天然产物中发现的放射性元素铀、钍、钋、镭、氡、钫、锕、镤等。人工放射性元素是指最初通过人工核反应合成的放射性元素，合成的第一个人工放射性元素是周期表中的第43号元素锝（1937年），以后又陆续合成了砹、镎、钚、镅、锔、锫、锎、锿、镄、钔、锘、铹以及104～109号元素。

放射性指示剂 radioactive indicator 化学性质和生物学特性与被示踪物质相同或相近的物质。可用它指示和追踪实验系统内被示踪物的分布、迁移转化和累积规律。如用放射性锶来研究钙在体内的动力学，用放射性碘化蛋白来研究血浆蛋白的代谢过程等。参见放射性同位素示踪法条。

放射源 radioactive source 用天然或人工放射性核素制成的、以发射某种辐射为特征的制品。习惯上将用于γ辐射照相探伤、放射治疗、辐射加工、辐射效应研究等的γ放射源专称为辐射源。按所释放射线的类型，分为α放射源、β放射源、γ放射源、中子源等。基于放射源发出的射线与物质相互作用所产生的电离、吸收、散射、活化等效应，放射源可用于放射性静电除尘、射线照相探伤，辐射消毒灭菌，用作放射治疗源、活化分析的中子源、电真空管电离源，制作各种检测仪器，如离子感烟探测器、电子捕获鉴定器、密度计、厚度计、料位计、中子水分测定仪等，以及用于辐射育种、辐射加工、食品辐射保存、辐射化学研究等。

放射自显影 autoradiography 在纸色谱或薄层色谱中用来显示被分离放射性组分色谱位置的一种方法，主要用于放射性物质的色谱分析。放射活性的物质可以使照相底片感光，将展开后得到的色谱纸或薄层板放在包有黑纸的照相底片上，使之感光，由底片感光的部位就可确定色谱图上放射性化合物的位置。也可用放射性记数装置来测定纸或薄层板上放射性化合物的位置。

放射自显影术 autoradiography; ARG 利用照相乳胶记录和探测样品中放射性物质所在位置和数量的技术。放射性核素放射的射线使照相乳胶中的卤化银电离形成潜影，显影后形成可见的黑影（放射性的"自像"），反映了样品中放射性的位置和数量。它分为三种类型：宏观自显影，用来研究放射性示踪剂在宏观样品中的分布；光学显微镜自显影，用来研究放射性示踪剂在组织或细胞中

的分布；电子显微镜自显影，用来研究放射性示踪剂在细胞各组成结构中的分布。该法设备简单，操作方便，定位精确，可以定量，在生物医学和科学研究中应用广泛。

飞行时间质量分析器 time of flight mass analyzer 一种结构最简单的质量分析器。主要由一个长度 L 的无场真空管（漂移管）构成。质荷比为 m/z 的离子从离子源被加速（加速电压为 V）引出后，进入无场空间，经过一定时间 t 秒后到达漂移管另一端，不同质荷比的离子因速度不同，到达固定距离所需的飞行时间不同，其运动方程可写为

$$\frac{m}{z}=\frac{2V}{L^2}t^2$$

当 V、L 不变的条件下，飞行时间 t 与质荷比的平方根成正比。测定飞行时间 t 即可确定 m/z 的值。这种依据飞行时间来测定质量的分析器叫飞行时间质量分析器。

飞行时间质谱 time-of-flight mass-spectrometry; TOFMS 一种根据离子飞到检测极所需的时间来确定离子的荷质比的分析手段，属于质谱的一种。这种质谱仪的质量分析器是一个离子漂移管。由离子源产生的离子加速后进入无场漂移管，不同质量的离子的飞行速度不同，从而将把不同质量的离子按 m/z 值大小进行分离。特点是可检测的分子量范围大，灵敏度高，扫描速度快，仪器结构简单；主要缺点是分辨率低。20 世纪 90 年代由于技术上的突破，分辨率得到很大的提高，飞行时间质谱仪已成为当今质谱仪器发展的主流。一般利用离子束或激光对样品表面离子化，使表面离子在加速电场中飞行，根据飞行时间就可以获得离子的质量，从而进行成分分析。其质量分辨率以及分析的质量数要比次级离子质谱高得多，特别适合有机化合物、高分子材料以及生物物质的研究。

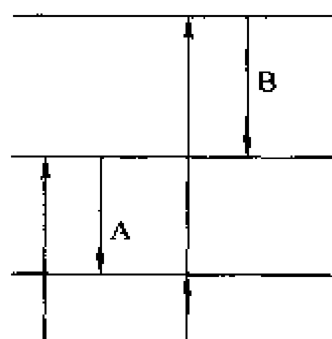
非法拉第电流 nonfaradaic current 当改变外加电压时，向双电层充电所产生的电流，其电量不符合法拉第定律。利用双电层电流可以研究电极界面的吸附。

非方差齐性 heterocedasticity 各个方差之间在统计上有显著性差异。若各方差之间在给定显著性水平没有显著性差异，则称为方差齐性，亦称等方差性、同方差性或方差一致性。

非辐射跃迁 non-radiative transition 电子由一个能级过渡到另一个能级，称为跃迁。原子获得能量后，电子由低能级向高能级跃迁。在一般情况下，激发态原子很快（10^{-8}s）由高能级向低能级跃迁，释放出光子，称为自发发射。原子在某些高能级比较稳定，可以停留较长的时间（10^{-3}s），这种能级称为亚稳态。原子由激发态以非辐射方式向亚稳态或基态跃迁，不释放光子，称为非辐射跃迁。

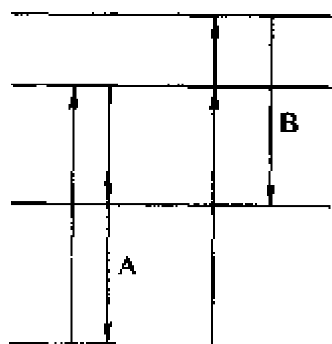
非共振原子荧光 non-resonance atomic fluorescence 当激发原子的辐射波长与受激原子发射的荧光波长不相同时，产生非共振原子荧光。非共

振原子荧光包括直跃线荧光、阶跃线荧光和反斯托克斯荧光，它们的发生过程如下图。



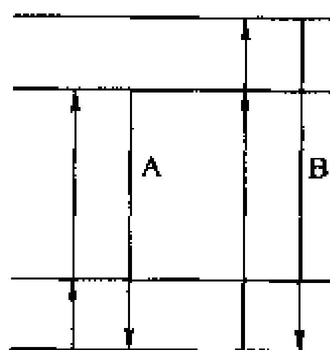
直跃线荧光

A—起源于基态；B—起源于亚稳态



阶跃线荧光

A—正常阶跃线荧光；B—热助阶跃线荧光



反斯托克斯荧光

A—起源于亚稳态；B—起源于基态

非还原糖测定 determination of nonreduced sugar 采用酸解方法把样品中非还原糖转化为还原糖后，按还原糖测定总糖量，减去还原糖量得非还原糖量。参见**铁氰化钾法测定还原糖**条。

非极性固定相 non-polar stationary phase 对分离起实质性作用的固定相表面的功能分子为非极性化合物的固定相。非极性有机分子（如硅烷、冠醚）通过化学键合连接在固定相表面的为非极性键合固定相，通过吸附作用固定在固定相表面的为非极性包覆固定相。非极性固定相是液相色谱中应用最多的固定相。

非极性键合相 non-polar bonded phase 硅胶表面键合了非极性有机基团烃基硅烷的固定相。常见的烃基有丙基、己基、辛基、十六烷基、十八烷基和苯基，其中以十八烷基键合相（简称 ODS 或 C_{18}）应用最广泛。

非金属离子传感器 non-metal ion sensor 可用于监测非金属离子的传感器。

非均匀增宽 inhomogeneous broadening ESR 谱线可以分为均匀增宽和非均匀增宽两类。在非均匀增宽的情况下，样品中各个未偶电子是处于各自略微不同的有效磁场中，因此，当外磁场扫描时，各时刻只有一小部分的自旋是处于共振状态，所观察到的谱线是大量个别分量叠加的结果，但各个分量之间有微小的共振位置不同，结果合成的波包近于高斯线型。另一种非均匀增宽是，在谱线的波包中某一特殊点上可能由于选择性饱和而突然凹下来，这表明某两个上、下能态具有布居数相等的情况。造成非均匀增宽的主要原因有：（1）磁场不

均匀；(2) 无规取向体系中的各向异性相互作用；(3) 存在尚未分辨出来的超精细结构。参见**自旋包**条。

非能斯特行为 non-Nernstian behavior 广义的非能斯特行为是指实际电位与按 Nernst 方程理论计算结果的偏离。例如，对 pH 玻璃膜电极而言，当被测溶液的 pH 太低或太高时，测得的 pH 值（即电位值）将不符合由 Nernst 方程表述的膜电位，从而产生所谓 pH 玻璃膜电极的“酸误差”或“碱误差”。

非破坏性检测器 non-destructive detector 检测过程中不改变样品化学结构和存在形态的检测器。如紫外-可见光、红外、电导和示差折光检测器都不破坏样品。

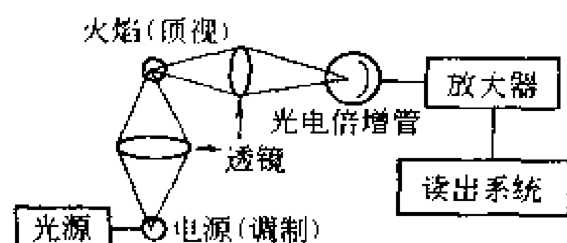
非强制检定 optional verification 由计量器具使用单位自己或委托具有社会公用计量标准或授权的计量检定机构，依法进行的一种检定。是对强制性检定范围以外的计量器具所进行的一种依法检定，计量器具法制管理的另一种形式，具有法制性，受法律约束，因此必须遵守有关计量检定规程。它与强制性检定的区别在于：强制性检定由政府计量行政部门实施监督管理，非强制性检定由使用单位自行依法管理，政府计量行政部门对其进行监督检查。

非热原子化器 nonthermal type atomizer 用非热方式使样品原子化的原子化器。在原子吸收光谱分析中，研究最多的非热原子化器是阴极溅射原子化器。利用辉光放电产生的正离子轰击作为阴极的试样表面，使试样表面的被测元素原子化。1987 年美国 Analyte 公司推出了第一台具有阴极溅射原子化器的原子吸收分光光度计，1997 年 Leeman 公司在 BCEIA 会上展出了带有阴极溅射原子化器的新型原子吸收分光光度计，该仪器可快速程序分析 30 个元素。非热原子化器的优点是，原子化过程不受温度的影响，高温气相化学干扰比热原子化法小，基本消除了难熔碳化物的形成；原子化时间较长，有利于多元素同时测定；线性动态范围宽；能进行固体样品表面的逐层分析；能同时测定基体元素和杂质元素，亦能直接测定碳、磷、硫等非金属元素。

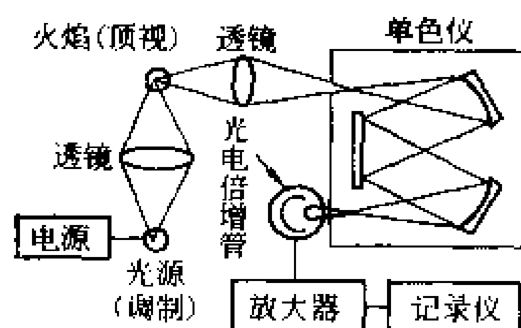
非色散 X 射线吸收分析法 nondispersive X-ray absorption analysis 与化学分析中应用白色光的比色法或光度法相似的 X 射线吸收分析法。本法是利用 X 射线源发射的、未经色散的原级 X 射线束直接透过厚度相等、组成相似的试样和标样，根据透射 X 射线束强度随待测元素含量变化的规律，即朗伯-比尔定律，对试样中的待测元素进行定量测定。

非色散原子荧光分析仪 non-dispersion atomic fluorometer 原子荧光分析仪分非色散原子荧光分析仪与色散原子荧光分析仪。这两类仪器的结构基本相似，区别在于单色器部分。两类仪器的光路图分别如图(a)、(b)所示。非色散型仪器的色散系统对分辨能力要求不高，但要求有较大的集光本领，常用色散元件是滤光片，主要

作用是用来分离分析线和邻近谱线，降低背景。非色散型仪器的优点是照明立体角大，光谱通带宽，集光本领大，荧光信号强度大，仪器结构简单，操作方便。缺点是散射光的影响大。



(a) 非色散型



(b) 色散型

非水滴定 nonaqueous titration 或称非水溶液滴定（titration in nonaqueous solution）。主要指为解决水难溶的有机酸、碱，极弱酸、碱以及在水中不能进行的多元酸、碱的分步滴定和混合酸的分别滴定等问题，而采用在水以外的各种溶剂中进行滴定的一类容量分析法。非水滴定中常用的溶剂可分为酸性、碱性、两性及惰性四种，亦可混合使用。滴定弱酸时多用碱性溶剂，如胺类、酰胺等，滴定用的标准溶液多用甲醇钠-甲醇溶液或碱金属氢氧化物的醇溶液，以百里酚蓝等为指示剂；滴定弱碱时多用酸性溶剂，如乙酸、乙酸酐等，滴定用的标准溶液多用高氯酸的冰醋酸溶液，以甲基紫等为指示剂。滴定时亦可用电位法确定终点。溶剂和试样中的水分多通过与乙酸酐或金属钠的反应除去。由于温度对有机溶剂体积的影响较大，滴定和标定应尽量在相同温度下进行。

非水系凝胶色谱柱 non-aqua-system gel column 适用于非水系凝胶色谱（亲脂凝胶色谱或凝胶渗透色谱）分离的色谱柱。因为非水系凝胶色谱使用的流动相是可以溶解非凝胶状聚乙烯等合成高分子化合物的有机溶剂，因此，其固定相是不被这样的有机溶剂所溶解的多孔性凝胶状聚乙烯微粒。

非水相色谱 nonaqueous phase chromatography 以不含水的有机溶剂作流动相的色谱体系。如以极性有机溶剂和非极性固定相组成的色谱体系称非水反相色谱。

非弹性光散射 inelastic scattering 在散射中由于分子跃迁（如拉曼散射、荧光）和热声波（如布里渊散射）而引起的散射现象，它导致散射光频率位移（即能量变化）。

非弹性碰撞 inelastic collision 用量子理论解释光散射现象时，若光子与分子发生碰撞的过程中，光子不仅改变运动方向，而且光子与分子之间还发生能量交换，这类碰撞就称为非弹性碰撞。

非弹性平均自由程 inelastic mean free path；IMFP 具有一定能量的电

子连续两次非弹性碰撞之间所经过距离的平均值。在表面分析中是一个重要参数，可以用来估计具有不同能量的电子所携带的信息深度，在 AES 和 XPS 的定量分析中还可以用它来计算基体效应及原子灵敏度因子。理论上它可由介电常数算出。一般来说，金属的非弹性平均自由程（1nm）要比氧化物小，而有机材料的非弹性平均自由程较大（3～5nm）。

非弹性散射 inelastic scattering 光子与分子相互作用过程中，因光子与分子之间发生能量交换，从而使光子散射频率发生改变的散射。拉曼散射、布里渊散射都属于非弹性散射。

非特征吸收 non-specific absorption 在原子化过程中产生的氧化物、卤化物、盐类分子等对入射辐射的吸收。它与共振吸收线的特征吸收不同，与被测元素原子的能级机含量无关，表现为带状吸收。它形成背景叠加在原子吸收上，导致吸光度测定值增高，在分析中，要设法校正非特征吸收所形成的背景。

非吸附性载体 non-adsorptive support 用于非吸附机理的色谱填料。溶质在这种填料表面不是以吸附相互作用被保留，而是以其他机理（如分配、离子交换等等）保留。

非吸收线 non-absorption line 不对入射的特征辐射产生吸收的谱线。可用邻近分析线的非吸收线来校正背景。

非线性分流 non-linearity split stream 在毛细管柱色谱中，分流进样对样品产生的歧视现象，即在分流后，进入色谱柱的样品组成、含量与分流前的实际样品相比发生了变异，这给定性、定量分析带来较大的误差，因此对进样系统的首要要求是避免歧视现象。

非线性光学 nonlinear optics 与入射光的振幅不成比例，出现 2 次方以上高次效应的光学现象。非线性光学的研究内容包括光的高频发射在内的光混合、饱和吸收、诱导拉曼散射、诱导布里渊散射、多光子迁移、与光强度有关的折射率变化、谱线形状和中心频率变化以及与上述过程有关的现象。分子与光作用时，分子被极化，其偶极距用量子力学中的摄动论计算强电磁场中物质的响应函数，然后通过电磁波方程式导出放射场中的变化。对于电磁场以及物质体系可同时用量子化处理，用多重过程进行描述，但光子的多重性与摄动计算的次数没有简单对应关系。

非线性回归 nonlinear regression 对具有非线性关系的因变量与自变量进行的回归分析。处理非线性回归的基本方法是，通过变量变换，将非线性回归化为线性回归，然后用线性回归方法处理。如对数函数 $y = a + b\log x$，通过将 $\log x$ 转换为 X 便变成了线性函数 $y = a + bX$。同样地，通过变量变换可以将幂函数、指数函数、S 型函数转变为线性函数。

非线性激光光谱学 nonlinear laser spectroscopy 当激光能量超过一定阈值后，会在被照射物质中引起非线性

光学效应，从而造成种种非线性光谱现象。例如，激光能级粒子数分布变化、多光子吸收跃迁等等。目前比较成熟的有饱和吸收光谱术和双光子光谱术，它们都能克服由于多谱勒增宽效应造成的精细光谱结构淹没作用，从而获得极高的光谱分辨率，在光谱精细结构研究和较高分辨光谱分析工作中发挥很大作用。

非线性拉曼光谱 non-linear Raman spectroscopy 由非线性拉曼效应产生的光谱。参见**非线性拉曼效应**条。

非线性拉曼效应 non-linear Raman effect 在线性拉曼效应中，入射光的电场 $\boldsymbol{E}$ 作用到分子所产生的感生偶极矩 $\boldsymbol{P}$ 时，$\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 成正比，$\boldsymbol{P}=\alpha\boldsymbol{E}$。而当聚焦的巨脉冲激光束的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 很大时，同时还产生电场对感生偶极矩的非线性贡献，由此产生的拉曼散射，称之为非线性拉曼散射效应。超拉曼效应、受激拉曼效应、逆拉曼效应和相干反斯托克斯拉曼效应都是非线性拉曼效应。

非线性内插法 method of non-linear interpolation 用阿贝比长仪或测量显微镜测量波长的方法是先测出谱线间的距离，再把它换算为谱线的波长。换算的方法一般有三种——线性内插法、非线性内插法、哈特曼内插法。通常谱线的分布是非线性的，常用非线形内插法。根据非线性方程式，未知谱线的波长为

$$\lambda=\lambda_0+al+bl^2+\cdots$$

式中，λ_0，a，b …为待定系数；l 为未知谱线的测量读数。若取二次形式，并对三根已知铁谱线进行测量，可得联立方程式

$$\lambda_1=\lambda_0+al_1+bl_1^2$$
$$\lambda_2=\lambda_0+al_2+bl_2^2$$
$$\lambda_3=\lambda_0+al_3+bl_3^2$$

式中，λ_1，λ_2，λ_3 为三根已知铁谱线的波长；l_1，l_2，l_3 为三根已知铁谱线的测量读数。解方程得 λ_0，a，b 三个数值。利用所确定的数值，测出在三根已知谱线之间的未知谱线的读数值，可以计算未知谱线的波长。非线性内插法不要求谱线分布均匀，适用范围较宽。

非线性色谱 non-linear chromatography 色谱信号（峰高或峰面积）的大小与进样量（样品浓度）不成线性关系的情况下进行的色谱过程。柱超载下的色谱过程就是非线性色谱过程。分析型色谱因需在线性范围内才能进行准确的定量分析，故应避免非线性色谱操作，而在制备色谱中则往往是在柱超载的情况下进行非线性制备。

非线性吸附等温线 non-linear adsorption isotherm 这是在气-固色谱中经常出现的等温线类型。当气相中被吸附物质的浓度过大时，吸附剂上被吸附物质的量不随气相中该物质浓度的增加而成线性地增加，这时等温线呈向下弯曲的形式（朗格缪尔吸附等温线），其对应的色谱峰为拖尾峰。当气相中被吸附物质的浓度较高时，吸附剂上的吸附量随气相中物质浓度的增加而急剧增加，这时等温线呈向

上弯曲的形式，其对应的色谱峰为伸舌峰，减少进样量或降低样品的浓度是改善上述非理想状态的有效措施。

非相干散射 incoherent scattering 不但改变了入射辐射的方向，而且能量也不同于入射辐射的散射，又称为康普顿散射。非相干散射的产生是因为光具有粒子性，当入射光子与电子发生弹性碰撞后，根据弹性碰撞的动量守恒原理，既改变了光子前进的方向，也改变了光子的能量，即：散射的波长与入射辐射不同，散射波长的改变量与入射波长无关，只取决于散射角。由于散射波的波长并不相同，所以它们之间不发生干涉作用。非相干散射的强度与由相干散射产生的晶体衍射强度相比要弱得多，因此，只是在晶体衍射图上产生微弱的背景。

非选择性脉冲激发 non-selective pulse for excitation 使整个图谱的频率范围内的被测核同时受到等强度激发。为此要求观测脉冲的射频场场强 $\boldsymbol{B}_1$ 尽可能强，一般称为强脉冲或硬脉冲，而辐照时可以用宽频带射频场。

非抑制型电导检测 nonsuppressed conductance detection 又称直接电导检测。是直接测定柱流出物电导的一种离子色谱检测方法。通常使用背景电导低的有机弱酸或其盐的水溶液作流动相。被测离子与淋洗离子电导率差值越大，则检测灵敏度越高。一般而言，它的灵敏度比抑制型电导检测要低约一个数量级。

非抑制型离子色谱法 non-suppressed ion chromatography; NSIC 又称单柱离子色谱法。是不采用抑制器抑制背景电导，而将柱流出物直接导入检测池进行电导检测的离子色谱法。当以弱电解质（如有机羧酸或其盐）作流动相时，因流动相本身的电导率较低，不使用抑制器也能获得较高的检测灵敏度。一般而言，非抑制型离子色谱法的检测灵敏度比抑制型离子色谱法低约一个数量级。

非正态分布 abnormal distribution 分析测试数据的一种分布形态。在通常的情况下，测量数据遵从正态分布，可分别用测量值的平均值和标准偏差来描述一组测量值分布的集中趋势和离散特性，如为等精度测量，用算术平均值和标准偏差描述一组测量值分布的集中位置和离散特性；如为非等精度测量，则用加权平均值和加权标准偏差描述一组测量值分布的集中位置和离散特性。在痕量分析中，或者在试样中被测组分含量波动性很大时，测量值在相当多的情况下不遵从正态分布，有时需将数据经过对数变换后才遵从正态分布，此称为对数正态分布，此时需用几何平均值和几何标准偏差描述该组测量值分布的集中位置和离散特性；而在有些情况下，即使将数据经过对数变换后仍不遵从正态分布，而遵从偏态分布，此时需将偏态数据正态化，即将普通坐标转换为几率坐标，使在普通坐标上呈偏态分布的数据转换为正态分布，然后求出其平均值和标准偏差。

菲涅耳衍射 Fresnel diffraction 光在传播过程中遇到挡光物时，若挡

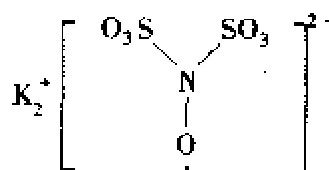
光物的尺度很小（可与入射光波长值相比拟）时，会在按“光直线行进”的几何光学理论形成的挡光物阴影里发现有光能量分布，这种绕开挡光物传播的现象称为光的衍射。若光源与挡光物之间的距离为有限远时，所发生的衍射称为菲涅耳衍射。圆形小屏或小圆孔会形成同心圆环状的明暗交替衍射花样（光强分布图），直边挡板（如刀口）形成的菲涅耳衍射花样是未挡光区出现平行的直条纹，一条很细的金属丝（或细透光缝）会形成平行的直条纹组。

肥料分析 fertilizer analysis 分析肥料提供植物营养的主要养分含量。如：氮肥中氮含量的测定，磷肥则根据其性质和溶解度的不同可分为水溶性磷、碱性柠檬酸铵溶性、2%柠檬酸溶性、中性柠檬酸铵溶性和强酸溶性磷含量的测定；钾肥中的全钾含量，有机肥除了测定全氮、全磷和全钾外，还测定速效氮的含量等。

废水处理 waste water treatment 废水处理就是将工业废水和城市生活污水处理至无害状态的过程。废水处理方法有很多种，目前较常用的有电渗析法、化学沉淀法、活性炭吸附法、电解法、离子交换法、萃取法、离子浮选法、反渗透法、化学氧化法、离子膜法、重力分离法、超滤法等。但具体选用何种方法进行处理，还要看废水的具体类型。

费尔盖特效益 Fellgett advantage 色谱型分光光度计中，由于检测器不能响应入射光的频率，只能响应其强度，因此需要依次测定从出射狭缝出来的单色光而获得红外光谱，而傅里叶变换光谱仪的干涉仪是在整个扫描时间内同时测定所有频率的信息。这个特性称为“多路传输”优点，或称费尔盖特效益。一般在1s内即可完成全谱扫描，对于研究瞬时反应，与气、液色谱联用特别适合。

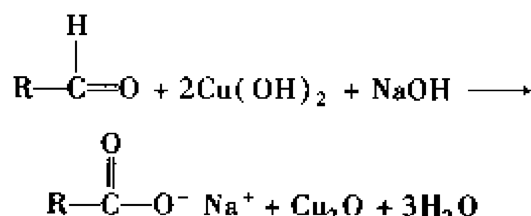
费里米盐 Fremy's salt 即亚硝基二磺酸钾（dipotassium nitrosodisulfonate）。一种稳定的钾盐自由基，通常配制成含有碳酸钾的水溶液后，作为ESR测试时的标准样品，其ESR谱为等高的三重峰，常用于确定样品的g值及校正磁场扫场宽度。费里米盐的g值为2.0055，由氮原子引起的超精细耦合裂分常数为1.30mT。



费理德定律 Friedel's law 晶体散射X射线时，衍射强度的中心对称定律，即：$I_{hkl}=I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$，式中$I_{hkl}$和$I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$分别是衍射$hkl$和$\bar{h}\bar{k}\bar{l}$的强度。当晶体为非中心对称的结构，且组成晶体的原子中有一部分具有显著的反常散射效应时，Friedel定律有可能不再成立，即衍射hkl和$\bar{h}\bar{k}\bar{l}$的强度会有所不同，利用Friedel衍射对在衍射强度上的差异，可以测定分子的绝对构型。

费林试剂 Fehling reagent 一种检查有机化合物中有无脂肪醛的试剂。由酒石酸钾钠、氯化钠和氢氧化

钠等试剂配制而成。当费林试剂将醛氧化成相应的羧酸时，溶液由深蓝色（酒石酸与 Cu^{2+} 的配合物）转变为红色（Cu_2O）。



费林试剂不与芳香醛发生类似反应，利用此性质辅与能氧化芳香醛的试剂（如氧化银的氨溶液，$Ag(NH_3)_2OH$，称多伦试剂），可区别这两类醛。

费马原理 Fermat principle 光在传播过程中一定沿着所需时间为极值的路径传播。即光从空间一点传播到另一点，一定沿着光程（在光速恒定时就是所需的时间）值为最小、最大或为常量的路径传播。数学表达式为

$$\delta\sum nl=0$$

式中，n 为折射率；l 为光传播的几何路径。

费米共振 Fermi resonance 当一个基团的倍频或组合频与另一基团的基频具有相近的振动能级时，由于其相互作用而产生的强吸收带或发生谱峰分裂的现象。即当一个振动 ν_i 的频率偶然与另一个振动的倍频 $n\nu_j$ 或其他两个振动的组频 $\nu_k \pm \nu_l$ 相近或相等，且 ν_i 与 $n\nu_j$ 或 $\nu_k \pm \nu_l$ 的振动对称性相同时，这时这两种振动产生强烈的相互作用，一个吸收峰向高频移动，一个吸收峰向低频移动，且强度小的 $n\nu_j$ 或 $\nu_k \pm \nu_l$ 增大。这一现象是费米在研究 CO_2 分子光谱时首先发现的，故称为费米共振。CO_2 在 $1350cm^{-1}$ 处的全对称的伸缩振动正好与二重简并的弯曲振动 $672cm^{-1}$ 的第一倍频 $1344cm^{-1}$ 接近，且这个具有三重简并能级的倍频中有一能级属全对称。由于能级相近，对称相同，产生费米共振，于是在 $1286cm^{-1}$ 和 $1388cm^{-1}$ 处产生两条强度大致相等的分立的谱带。

费米接触超精细相互作用 Fermi contact hyperfine interaction 费米（Fermi）推导的各向同性超精细相互作用的理论公式是

$$\hat{H}=-\frac{8\pi}{3}g\beta g_n\beta_n|\psi(0)|^2\hat{S}_z\hat{I}_z=a\hat{S}_z\hat{I}_z$$

式中，a 既是各向同性超精细耦合常数；$|\psi(0)|^2$ 代表未偶电子在原子核处的几率密度。显然只当 $|\psi(0)|^2$ 不为零时，各向同性超精细相互作用才会使波谱产生各向同性超精细结构。对原子或离子而言，当未偶电子在 s 轨道上才满足 $|\psi(0)|^2$ 不为零的条件，即才会有费米接触超精细相互作用；如未偶电子在 p，d，f，…轨道上，则因它们在核处具有节点，故 $|\psi(0)|^2=0$，所以对各向同性超精细结构无贡献。由于 s 轨道在空间分布是各向同性的，所以费米接触超精细相互作用是一种各向同性的超精细相互作用。当一原子的未偶电子在非 s 轨道上时，经常也有各向同性超精细结构，这可由该原子的基态波函数中混杂有少量的 s 轨道成分而得到解释。

费米能级 Fermi level 金属导体的费米能级被定义为热力学温度零度（0K）时价电子（自由电子）所占据的最高能级。绝缘体、纯半导体的费米能级通常定义在价带和导带间歇的中间位置。测定固体物质表面的 XPS 谱仪的能标是以费米能级为零点的。

分辨本领 resolution power 谱仪相对分辨率的倒数称为分辨本领。谱仪的相对分辨率定义为谱峰半高宽（width at half maximum height，ΔE）与光电子动能 E 之比，即 $R=\frac{\Delta E}{E_0}$。分辨率表示分辨两个紧邻谱峰的能力，分辨率越高，分辨两个相邻谱峰的本领越强，所以分辨率的好坏关系到能否获取更多的化学状态信息。为了比较不同谱仪分辨率的差异，一般取银作为标准样品，在规定条件下测量银的 Ag $3d_{5/2}$ 谱峰的半高宽 ΔE。分辨率和灵敏度是谱仪的两项主要的指标。在扫描电镜中，分辨本领是以二次电子像分辨率来表示的，是指在特定的情况下如碳喷金的二次电子像上能清晰分开的两个物点之间的最小距离除以放大倍数。

分辨力 resolving power 单色器分开两条波长紧邻的谱线的能力。参见**分辨率**条和**波长分辨率**条。

分辨率 resolution 又称分辨本领。表示装置对紧密相邻信号或量值有效分辨的能力。在光谱学中，指分光计或检测器区别或辨认两条相邻近的光谱谱线的能力。根据瑞利准则规定，对于两根强度相等、轮廓相同的单色谱线来说，如果一根谱线的中央最大值落在另一根谱线的第一个极小值时，这两根谱线是能分辨的；否则，这两根谱线是不能分辨的。分辨率的计算公式为 $R=\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$，式中，$\Delta\lambda$ 是根据瑞利准则恰能分辨的两条谱线的波长差；λ 是两条谱线的平均波长。棱镜的分辨力由下式给出：$R=l\frac{\partial n}{\partial\lambda}$，式中，$l$ 是棱镜的底宽；$\frac{\partial n}{\partial\lambda}$ 是棱镜的色散力。光栅的分辨力由下式给出：$R=mN$，式中，m 是光栅的衍射级次；N 是光栅刻线总条数。

分辨效应 differentiating effect 亦称区分效应。根据酸碱质子理论，在两性溶剂中，最强的酸是溶剂合质子，最强的碱是溶剂阴离子。在这种溶剂中，可以分辨出酸强度比该溶剂合质子酸强度小的那些酸的强度；或是可以分辨出碱强度比该溶剂阴离子碱强度小的那些碱的强度。这种效应称为分辨效应。例如，在水溶液中能分辨比 H_3O^+ 弱的酸，如 HAc，NH_4^+，$C_5H_5NH^+$，HCO_3^- 等的强弱，而不能分辨 $HClO_4$，H_2SO_4，HCl 和 HNO_3 的强弱；但在冰醋酸中，则可分辨这四种酸的强弱。对于惰性溶剂没有明显的质子授受现象，即没有明显的酸性和碱性，无拉平效应，但对不同强度酸或碱有分辨效应。参见**拉平效应**条。

分别分析 separate analysis 利用特效反应，可以不考虑试样中其他组分的存在直接检出或测定其中的某组

分。利用数个特效反应则可分别直接检出和测定其中的数种组分。这种分析方法称为分别分析。例如，可用 NaOH 和 $K_4Fe(CN)_6$（亚铁氰化钾）作试剂，分别直接从溶液中检出 NH_4^+ 和 Fe^{3+}。但由于可用于特效反应的特效试剂不多，多数情况下都需要预先进行一定的分离后，才能检出或测定试样中的某种组分。

分布的数字特征 numerical characteristic of distribution 亦称分布的特征数，描述测量值概率分布特征的数字。测量值是一个以概率取值的随机变量，具有一定的概率分布，可用位置与形状两个基本参数来描述其分布特征。如正态分布

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

可用位置参数 μ 表征分布的集中位置，形状参数 σ 表征其离散特性。因为只要确定了 μ 和 σ，就可以计算出任意 x 值出现的概率。因此，可用 μ 和 σ 两个基本参数来代表正态分布，简记为 $N(\mu,\sigma^2)$。

分布分数 distribution fraction 亦称分布系数 distribution coefficient 平衡体系中，同一物质各种存在型体的平衡浓度占其总浓度的分数，常以 δ 表示。例如，浓度为 c 的二元酸 H_2A 的水溶液，由于离解平衡的存在，溶液体系中可能存在三种型体，其平衡浓度可分别表示为 $[H_2A]$、$[HA^-]$ 和 $[A^{2-}]$，则根据分布系数的定义和离解平衡关系式，各型体的分布系数可分别表示为

$$\delta_{H_2A}=\frac{[H_2A]}{c}=\frac{[H^+]^2}{[H^+]^2+[H^+]K_{a_1}+K_{a_1}K_{a_2}}$$

$$\delta_{HA^-}=\frac{[HA^-]}{c}=\frac{[H^+]K_{a_1}}{[H^+]^2+[H^+]K_{a_1}+K_{a_1}K_{a_2}}$$

$$\delta_{A^{2-}}=\frac{[A^{2-}]}{c}=\frac{K_{a_1}K_{a_2}}{[H^+]^2+[H^+]K_{a_1}+K_{a_1}K_{a_2}}$$

显然，$\delta_{H_2A}+\delta_{HA^-}+\delta_{A^{2-}}=1$。根据溶液的 pH 和物质的酸性常数定量计算各种酸碱型体的浓度，从而定量地说明各种酸碱型体的分布情况。同理，可计算配位平衡中各级配合物的分布系数和平衡浓度。

分步沉淀 fractional precipitation 在含有几种离子的溶液中，加入一种沉淀剂，根据溶度积规则，对于同种类型的难溶化合物 K_{sp} 小的先沉淀，K_{sp} 大的后沉淀，这种先后沉淀的作用称为分步沉淀。例如，在含有等浓度 Cl^- 和 I^- 的溶液中，逐渐加入 $AgNO_3$ 溶液，由于 $K_{sp(AgI)}<K_{sp(AgCl)}$，因此先生成黄色的 AgI 沉淀，继而再生成白色的 AgCl 沉淀。利用分步沉淀原理，可将两种离子分离。沉淀先后的次序除以溶度积大小有关外，还与被沉淀离子的浓度和沉淀时的条件有关。

分部分析 segment analysis 指利用掩蔽法或简单的分离方法排除干扰后检出离子的定性分析方法。相对于

系统分析法，它不需要经过冗长的分组操作，更为简便。例如，在经典的系统分组分析中，镍离子在第三组才能检出，而若用分部分析，则只要在试液中加入过量的氧化锌悬浊液使铁、铝、铬、汞、铅、铋、铜等干扰离子以氢氧化物沉淀析出，过滤，即可在滤液中用丁二酮肟检出镍。

分层抽样 stratified sampling 又称分类抽样或类型抽样。是依主要影响因素将样品总体划分为若干个同质层，再在各层内随机抽样或机械抽样。各层内样品差异较小，样本能较好地代表本层样品的总体情况，综合各层的样本也就能够更好地代表全部样品的总体情况。依据在同质层内抽样方式不同，它分为一般分层抽样和分层比例抽样。一般分层抽样是根据样品变异性大小来确定各层所抽样本的大小，变异性大的样品层多抽样，变异性小的样品层少抽样。分层比例抽样是不管各层样品变异性的大小，都按同一的比例从各样品层抽样。分层抽样的特点是将科学分组法与抽样法结合在一起，分组减小了各样品层变异性的影响，抽样保证了所抽取的样本具有足够的代表性。

分光光度法 spectrophotometry 又称吸收光度法（absorption spectrophotometry）。是利用物质本身对光的吸收特性或借助加入显色剂使被测物质显色，根据其对不同波长单色光的吸收程度而对物质进行定性和定量分析的一类分析方法。由吸光度对波长作图所得的吸收曲线，可用于物质的定性鉴定，由某物质在一定波长处测得的吸光度与其浓度作图得到的工作曲线可用于该物质的定量分析。由于分光光度法灵敏较高，选择性较好，设备简单，在各行各业中都得到广泛应用。

分光光度法的灵敏度 sensitivity of spectrophotometry 可见区分光光度法的灵敏度常用两种方法表示。一种是用摩尔吸光系数 ε 表示（参见**摩尔吸光系数**条），ε 值越大，该显色反应越灵敏。可以根据不同显色剂与同一元素形成的有色化合物的 ε 值的大小，来比较它们测定此元素的灵敏度；另一种是用桑德尔灵敏度 S 表示（参见**桑德尔灵敏度**条），S 数值越小，该法的灵敏度越高。

分光晶体 analysing crystal 又称晶体分光器或单色器。它在 X 射线荧光光谱仪中的作用，同棱镜或光栅在光学发射光谱仪中的作用类似。它使次级（荧光）射线束衍射，并色散成空间波谱，从而对 X 射线的波长进行分析，获得元素种类的信息。它是 X 射线荧光光谱仪中的关键部件。

分光棱镜 spectroscopic prism 分光棱镜是一种能够分光的光学元件，是棱镜光谱仪的核心。棱镜的材料决定光谱仪的工作光谱区；棱镜的类型决定光谱仪的基本类型。分光棱镜的材料必须是透明度较高、透过光谱区较宽、色散率较高的、光学均匀性较好的以及化学性质稳定的物质。最常用的有光学玻璃、石英晶体、萤石和

碱金属卤化物晶体等。按照棱镜的材料、形状和作用的不同，分光棱镜通常分为三棱镜和考纽（Cornu）棱镜，立特罗（Littrow）棱镜，卢瑟福-布朗宁（Rutherford-Browning）棱镜，阿贝（Abbe）棱镜。棱镜的分光作用是以光的折射现象为基础的。

分解电压 decomposition (resolving) voltage 又称分解电势和分解电位。是引起电活性物电解的最低外加电压。各种电活性物的分解电压随电解条件（温度、电流密度、溶液浓度、电极材料等）的不同而异。此外，实际需要的分解电压常高出理论计算所得的分解电压。

分离度 resolution 又称分辨率，是指相邻两组分保留值之差与两组分色谱峰基线宽度总和之半的比值，以 R 表示，其表达式为

$$R=\frac{2t_{R(2)}-t_{R(1)}}{[W_{(1)}+W_{(2)}]}$$

式中，$t_{R(2)}$、$t_{R(1)}$分别为1、2两组分的保留时间（也可以采用其他保留值）；$W_{(1)}$、$W_{(2)}$分别为1、2两组分色谱峰的基线宽度（与保留值单位一致）。它是定量描述样品中相邻两组分在色谱柱中分离情况的重要指标，反映了色谱过程中的热力学和动力学特性，可定量评价柱效能。

分离度的另一重要描述方式为

$$R=\frac{1}{4}\sqrt{n}\frac{\alpha-1}{\alpha}\frac{k'}{1+k'}$$

式中，n 为理论塔板数；α 为溶剂效率；k'为容量因子，此公式关联了分离度与其他三个重要色谱参数之间的关系，可以通过调节 n、α、k'来改善分离度。

分离-反应-分离展开 SRS development 也称反应薄层法。是一种双向展开技术，与一般双向展开法不同的是在两个方向展开时使用的是同一种展开剂。将样品点在薄层板的一角，第一次展开后将薄层板用加热、光照或用酸/碱蒸气等方法处理显色后，将薄层板转90°，于垂直于第一次展开的方向上用相同展开剂再进行第二次展开，显色后，凡在对角线上的成分都是性质稳定的成分，而不在对角线上的成分是经处理后新产生的成分。

分离火焰 separated flame 将火焰的焰心区和外焰区适当分离使内焰区（分析区）予以拉展的一种火焰。在全消耗型燃烧器上加一石英套管，使火焰的燃烧发生在套管内燃烧器口上，外焰区的燃烧维持在套管上部，使焰心区和外焰区分开一定距离和内焰区扩展。或者，用惰性气体在火焰周围形成一个屏蔽鞘，隔离周围的大气。它可以改善火焰在短波区的透射性能和高温元素的测定条件。如用氧气形成屏蔽鞘，提高火焰外缘的温度，使用富燃火焰，能更稳定地燃烧，可以改善容易生成难熔氧化物的元素的原子化，而且由于内焰区的扩展，减少了测量位置对测定结果的影响。

分离培养基 isolation medium 分离培养基是微生物学检验中确诊的关键步骤，只要分离出微生物才能进一步鉴定和做纯菌药敏试验。所以就必

须采用特定培养基，通过平板划线分离法，使混杂的多种细菌在培养基表面分散生长，各自形成菌落。所用的分离培养基除含营养成分等有利于所分离细菌的生长外，还可加入抑制剂以抑制杂菌生长。

分离商 separation quotient 一种分离过程中，两种物质 A、B 的分离商 α 定义为

$$\alpha = \frac{(K_p)_B}{(K_p)_A}$$

分离商 α 适用于不同的分离过程，在液-液萃取分离过程中，式中 $(K_p)_A$、$(K_p)_B$ 分别为两种物质的分配系数。在蒸馏分离中，K_p 代表蒸气压 p^0，在色谱分离中，K_p 代表校正保留体积(V_R')，通常将较大的 K_p 作为分子，较小的作分母，因此，α 值总是大于等于 1，α 值越大，两种物质越易实现分离。但最终的分离效率还与被分离物质的 K_p 具体数值有关。一般两种物质的分配系数的乘积为 1，且 α 值较大时分离最有效。

分离数 separation number 衡量色谱分离能力的重要参数之一，以 S_N 表示。它是指在两个相邻碳数(Z 和 $Z+1$)的正构烷烃色谱峰之间能容纳分离度 $R=1.177$ 的色谱峰峰数。其表达式为

$$S_N = t_{R(Z+1)} - \frac{t_{R(Z)}}{W_{\frac{1}{2}(Z+1)}} + W_{\frac{1}{2}(Z)} - 1$$

式中，$t_{R(Z)}$ 和 $t_{R(Z+1)}$ 分别为相邻碳数正构烷烃的保留时间；$W_{\frac{1}{2}(Z)}$ 和 $W_{\frac{1}{2}(Z+1)}$ 分别为相邻碳数正构烷烃的半峰宽。有时可用其他相邻碳数的同系物代替相邻碳数的正构烷烃。对于平面色谱的分离数 S_N 是指 R_f 值在 0～1之间能完全分离的斑点数，其表达式为

$$S_N = \frac{a}{Y_{\frac{1}{2},0}} + Y_{\frac{1}{2},1} - 1$$

式中，a 为 $R_f=1$ 和 $R_f=0$ 两组分的斑点中心的距离(近似为原点至展开剂前沿的距离)；$Y_{\frac{1}{2},0}$ 为 $R_f=0$ 的组分的 $\frac{1}{2}$ 斑点宽度；$Y_{\frac{1}{2},1}$ 为 $R_f=1$ 的组分的 $\frac{1}{2}$ 斑点宽度。

分离因素 separation factor 用于描述两种组分分离效率的指数。例如，萃取分离中，在给定 pH 和试剂浓度条件下，金属离子 1 与金属离子 2 的分离因数 β 可表示为

$$\beta = \frac{D_1}{D_2} = \frac{K_{f(1)} K_{D_{MR_n(1)}}}{K_{f(2)} K_{D_{MR_n(2)}}}$$

即 D_1 与 D_2 分别是金属离子 1 与金属离子 2 的分配比，K_f 为配合物的形成常数，$K_{D_{MR_n}}$ 是配合物的分配系数，即分离效率取决于两种配合物的相对形成常数和相对溶解度。参见**分配比**条。

分离因子 separation factor 在不同学科中分离因子有不同的含义。在色谱分离中，它是评价色谱柱选择性的一种指标。定义为相邻二组分的保留值(V_R 或 t_R)的比值，以 S_f 表示。

$$S_f = \frac{V_{R_2}}{V_{R_1}} = \frac{t_{R_2}}{t_{R_1}}$$

式中，V_{R_2}、V_{R_1}分别为组分1和2的保留体积；t_{R_2}、t_{R_1}分别为组分1和2的保留时间。在萃取分离中，是用于描述两种组分分离效率的指数。定义为被分离物质A（如金属离子等）和B在同一萃取体系内，在相同条件下（如pH和试剂浓度等）分配系数的比值，以β表示。

$$\beta_{A/B}=\frac{D_A}{D_B}=\frac{\frac{c_{A_{org}}}{c_{A_{aq}}}}{\frac{c_{B_{org}}}{c_{B_{aq}}}}$$

式中，D_A、D_B分别为物质A和B的分配系数。显然，$\beta_{A/B}=1$时，A和B没有分离效果；如果$\beta_{A/B}$与1相距越远，则A和B的分离效果越好。

分离柱 separation column 又称色谱柱。是填充了色谱填料，用于混合物分离的柱管。参见**色谱柱**条。

分流 split stream 在毛细管柱色谱中，为适应样品容量小的特点而采取的一种进样措施。分流的目的是只允许一小部分混合气样品（相当于纳升级样品）进入色谱柱而其余大部分混合气被放空，同时也使载气以较短的时间将样品带入色谱柱中，大大减少了色谱峰的扩展。

分流比 split ratio 分流比是指进入毛细管的样品和载气的混合气体体积与放空的混合气体体积之比。对常规毛细管柱（ϕ0.22～0.32mm）的分流比一般为1:50到1:500，对大内径厚液膜毛细管柱的分流比较小，约为1:5到1:50，对小内径毛细管柱，其分流比超过1:1000。

分流进样 split sampling 一种用于色谱柱的微量样品的进样方法。在汽化室出口分流点处使气体分为两路，绝大部分放空，极小部分进柱子。它的优点是适用于各类样品，浓度范围较宽；定性、定量分析均很好；易清洗更换，不污染毛细管柱且柱效高；进样和气路系统易于控制，操作简单，易于自动化。但也有它的缺点，如使样品失真、会使样品和载气大量浪费等。为了克服这些缺点，可以采用关闭气流-分流进样法和停流-分流进样法。

分流进样法 split sampling 毛细管色谱中常用的一种进样方式，是指在毛细管柱入口处，按一定的分流比，通过分流阀将样品混合气分为两部分，一小部分样品混合气进入毛细管柱进行分离、分析，其余大部分混合气放空。目的是为了把微量样品瞬间引入色谱柱，提高柱效，避免由于进样时间过长而造成的谱带展宽，这种进样方法对宽沸程样品易产生非线性分流使样品失真。参见**非线性分流**条。

分流器 splitter 将液流或气流按一定比例分为两部分，而只使其中一小部分流入所需部位的装置。在毛细管柱色谱分析中，由于柱容量所限，常在进样处装上分流器，使小部分样品进入色谱柱，其余大部分放空，以防超载。在制备型色谱中，柱出口处装有分流器，使小部分柱流出物进入检测器获得信号，其余大部分不经检测器而流出柱外。

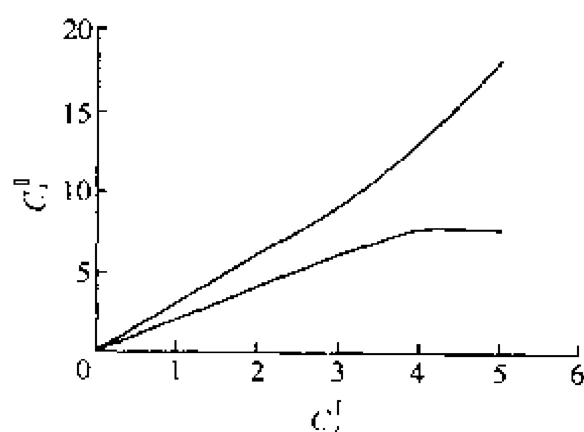
分馏法 fractionation 为了提高蒸馏的效率，在蒸馏设备中，常常在蒸馏瓶上方的蒸汽相出口处与冷凝液收集器之间增加一种表面积较大的柱子，以增加液体与蒸汽之间接触与平衡的机会，从而使蒸汽在柱中上升时产生多次蒸发与冷凝的平衡过程。不易挥发组分冷凝回到蒸馏瓶中，而使在气相中易挥发组分纯度提高，结果挥发度不同的组分分离度增加。这种蒸馏方法称为分馏法。这种柱子称为分馏柱，有不同的结构与形状。

分馏效应 fractional distillation effect 在分析岩石矿物时，将少量的粉末试样装入电极孔穴中，试样各组分在弧焰中的蒸发速度不同，沸点低的物质先蒸发，沸点高的物质后蒸发。这种不同物质先后蒸发的现象，称为分馏效应。

分馏柱 fractionation column 见分馏法条。

分配比 distribution ratio 液-液萃取分离中，溶质在有机相中各种存在形体的总浓度 $c_{有}$ 与其在水相中各种存在形体的总浓度 $c_{水}$ 之比，常用符号 D 表示，$D = c_{有}/c_{水}$。

分配等温线 partition isotherm 在一恒定温度下，平衡时体系中组分 i 在不相容的两相之间的分配可用其在Ⅱ相内的平衡浓度（$C_i^{Ⅱ}$）对它在Ⅰ相内的平衡浓度（$C_i^{Ⅰ}$）作图表示，称之为在温度 t 时，组分 i 在两相间的分配等温线。如图。分配等温线的斜率为 $K_i = \frac{dC_i^{Ⅱ}}{dC_i^{Ⅰ}}$ 在低浓度时，$K_i = \frac{C_i^{Ⅱ}}{C_i^{Ⅰ}}$，$K_i$ 称为在温度 t 时，物质 i 的浓度平衡分配系数。简称分配系数。在整个浓度范围内分配系数不一定是常数，通常在低浓度下分配系数为常数，这个区域称为符合亨利定律的区域；在浓度较高的区域分配系数发生了偏离，这是由于随着溶液浓度的增大，分子间距离减小、分子间相互作用使溶液性质偏离理想状态所致。分配等温线是研究分离过程的重要热力学方法。



分配定律 distribution law 描述溶质在两种互不相溶的溶剂中的分配的定律。一种物质溶解在两种互不相溶的溶剂中时，它在两相中的浓度之比约等于该物质在这两种溶剂中的溶解度之比。利用这个规律，可以用一种溶剂把另一种溶剂中的物质萃取出来，这正是溶剂萃取法的基础。例如，用与水不互溶的四氯化碳作溶剂，可以将含碘的水溶液中的碘萃取出来。

分配函数 partition function 即配分函数。以 q 表示。$q = \sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/kt}$ 或定义为 $q = \sum_j e^{\varepsilon_j/kt}$，两者等效。

分配色谱 partition chromatography

基于样品组分在固定相中的溶解度的不同而产生保留和分离的色谱模式。它包括液-液分配色谱和液固分配色谱。

分配系数 partition coefficient 在分析化学不同的学科领域，具体含义有所不同。在色谱分析中，它是指一定温度下，处于平衡状态时，组分在固定相中的浓度和在流动相中的浓度之比，以 K 表示，是分配色谱中的重要参数。在萃取分离中，它是指一定温度和压力下，当萃取平衡建立时，被萃物组分 A 在有机相中的浓度 $[A_{有}]$ 与在水相中的浓度 $[A_{水}]$ 之比（严格说，是活度比），以 K_D 表示，称为分配系数。其数学表达式为 $K_D = \frac{[A_{有}]}{[A_{水}]}$，此即为著名的分配定律。

分区监测 sub-zone monitoring 在进行区域环境检测时，常将一个城市或一个区域按其功能分为工业区、居民区、交通稠密区、商业繁华区、文化区、清洁区、对照区等。一般把多数点布设在工业区，其次是交通稠密区，其他区可根据实际和可能设置，但是对照点必须设置 1～2 个。这种功能区布点法在我国目前应用较广泛，它的最大优点是便于分析人体健康与污染物种类和浓度的相互关系，以及分析人为污染与环境质量的关系。此法适用于大中城市，尤其是功能区有明显区别的地域。

分散层 diffuse layer 又称扩散层。由于溶液中的热运动，非特性吸附的离子的分布具分散性，从外 Helmholtz 平面一直延伸到本体溶液。分散层的厚度依赖于溶液的总离子浓度。

分散系数 dispersion coefficient 用于描述样品在流路中的分散程度。其定义为分散前的样品中待测组分浓度于分散后产生信号的流体单元中待测组分的浓度比。

$$D = \frac{c^0}{c}$$

式中，c^0 为未分散之前的待测物浓度；c 为分散后的某段流体单元读出的待测物浓度。如果在峰顶读出分析结果，则 $c = c^{max}$，$D = \frac{c^0}{c^{max}}$。通常 $D>1$，因此是样品稀释的尺度。只有在采用预浓集技术时，才可能 $D<1$。分散系数用于描述试剂的分散程度时用 D_R 表示。

分散因子 dispersion factor; $\beta_{\frac{1}{2}}$ 用于描述轴向分散状况，定义为沿 FIA 响应曲线上升到稳态信号半值时的半峰值与所需样品体积或时间之比，即

$$\beta_{\frac{1}{2}} = \frac{S_{\frac{1}{2}}}{V_r} \text{或} \beta_{\frac{1}{2}} = \frac{t_{\frac{1}{2}}}{T}$$

式中，$S_{\frac{1}{2}}$ 和 $t_{\frac{1}{2}}$ 是达到 50% 稳态信号所需的样品体积或时间；V_r 或 T 是 FIA 通道的体积和保留时间。$\beta_{\frac{1}{2}}$ 是一个无量纲量，其大小依赖于通道的几何形状、长度、直径和流速，$\beta_{\frac{1}{2}}$ 越小，径向传质越强，系统性能越好。

分束器 beamsplitter 用来分裂光

束使之产生干涉的重要部件。它是一个半透膜，能让光透过一半，反射一半。目前，还未找到一种能在红外光的各种波段（近红外、中红外、远红外）都具有半透性质的半透膜。参见**中红外分束器**和**远红外分束器**条。

分数计量单位 sub-multiple unit of measurement 按约定比率由给定 SI 单位形成的更小的计量单位。国际单位制的倍数单位由 SI 词头构成，为 10 进制和 10^3 进制，如容量单位升（L），小数单位有毫升（ml）。

分斯克方程 Fenske equation 由相对挥发度方程可得

$$\frac{(X_A)_{汽}}{(X_B)_{汽}}=\alpha\frac{(X_A)_{液}}{(X_B)_{液}}$$

对于二元混合物系，$(X_A)_{汽}+(X_B)_{汽}=1$，$(X_A)_{液}+(X_B)_{液}=1$。因此有

$$\frac{(X_A)_{汽}}{1-(X_A)_{汽}}=\alpha\frac{(X_A)_{液}}{1-(X_A)_{液}}$$

式中，X 代表物质的摩尔分数；下角标 A、B 表示组分，汽、液表示物质所处的相；α 为 A、B 的相对挥发度。这是蒸馏分离的理论基础。设 A 为比较容易挥发的组分，在汽相中得到了富集。因此 α 总大于 1，可以看成一个富集因子。当分馏柱有 n 个理论塔板时，由于第一个塔板与蒸馏瓶之间有一个理论塔板，相当于平衡分配了 $n+1$ 次，则

$$\frac{(X_A)_{汽}}{1-(X_A)_{汽}}=\alpha^{n+1}\frac{(X_A)_{液}}{1-(X_A)_{液}}$$

这就是著名的分斯克方程。

分析范围 analytical range 分析方法中能够保证分析有效，并且达到分析质量要求的测定范围。一般指高于定量限且处于线性范围内的分析范围。是方法开发和进行方法验证时的重要参数。

分析化学 analytical chemistry 化学的一个独立的分支学科，它发展和提供合适的方法和技术，以获得物质组成和结构及有关分子和原子的能量状态与几何排列等信息。从具体任务来讲，它涉及物质的定性分析，定量分析，形态分析，结构分析，表面和逐层分析，是各行各业的“眼睛”。分析化学发展到今天，除了化学的四大平衡作为其处理与解决问题的理论基础之外，数学、信息论和计算机科学等的引入，使之建立在更广泛的理论基础之上，发展成为一门多学科交叉的综合性的分析化学信息科学。

分析器 analyzer 质谱仪的一个主要部件，又叫质量分析器。它的作用是将离子源产生的离子按荷质比（m/z）进行分离，以便得到按质荷比（m/z）大小顺序排列的质谱图。常用分析器有：磁分析器，磁场和电场组合的双聚焦分析器，四极杆分析器，飞行时间分析器，离子回旋共振分析器，离子阱质量分析器等。

分析器通能 analyzer pass energy 电子能量分析器中，允许通过分析器并被计数的电子的平均动能，也称分析器透射能量。分析器通能直接影响谱仪的能量分辨率和计数强度。通能越大其能量分辨率越差，而信号强度可以大幅度增加。在电子能谱分析

时，一般定性分析采用较大的通能、化学价态分析采用较低的通能。

分析数据的统计处理 statistical analysis of analytical data 应用数理统计方法对分析测试数据进行科学处理。分析测试一般都是抽样检验，从总体中抽出一定容量的样本，通过测试得到样本值，再由样本值以一定的置信度去推断总体的特性。保证抽样检验结论可靠的基本条件是：样本对总体有足够的代表性、样本测试结果准确可靠、统计推断科学合理。因为测量值是一个以概率取值的随机变量，各种大小测量值的出现是一种随机现象。由于测试过程不可避免地受到各种因素的影响。在个别试验中某一大小的测量值有可能出现，也有可能不出现，使得在同样条件下测得的测量值具有波动性，而在大量重复试验中得到的测量值又具有统计规律性。不对分析测试数据进行科学处理，就无法从具有波动性的测试数据中发现其统计规律性，进而引出符合客观实际的科学结论。由此可见，分析数据的科学处理是获得正确结论的基本前提之一，其目的是从获得的原始数据引出科学的结论，将原始数据转变为人们所需要的信息和知识。

分析天平 analytical balance 分析化学中用于称量的一种仪器。习惯上将感量为 0.1mg 的天平，即所谓万分之一（克）的天平称为分析天平。随着分析技术的微量化、微型化，对称量准确度的要求愈来愈高，分析过程中使用所谓十万分之一（感量为 0.01mg）、百万分之一（感量为 0.001mg）的天平已不鲜见。

分析线 analytical line 元素的原子结构，决定原子光谱的线系结构。因此，不同的元素，其谱线数目也不同。为了鉴定试样中元素的存在与否及其大致含量，只需检查几根便于观测的谱线就行。这些用作鉴定元素存在及测定元素含量的谱线，称为分析线。

分析线对相对强度 relative intensity of analytical line pair 又称线对强度比。采用内标法进行光谱定量分析时，将分析元素和内标元素的谱线组成"分析线对"，两者的强度之比（相对强度）称为分析线对相对强度。由于试样的蒸发、激发、辐射等条件不能严格控制，致使谱线的强度有波动。而采用内标线，在波动的情况下，由于内标线与分析线的强度受到同样的影响，因而谱线相对强度 $R=I_1/I_2$（I_1 为分析线的强度，I_2 为内标线的强度）较为稳定，有利于提高分析结果的准确度。

分析信号 analytical signal 在分析测试中与被测组分某一特性或量相关联的、并可根据它来确定被测组分特性或量的光、电、磁、热等响应信号，如光度分析中的透光率、吸光度，发射光谱中的光强，极谱分析中的扩散电流等。分析信号经过处理转化为有用的分析信息。

分析信号处理 analytical signal processing 对各种原始分析信号的进一步加工以获得有用分析信号的过

程。在原始分析信号中，常常混杂有噪声和干扰成分，它们不仅是误差源，而且直接限制分析仪器和分析方法的检测能力。分析信号处理包括分析信号平滑、滤波、积分、求导、变换、增强，拟合、图形绘制等，它可以减小和消除噪声与干扰信号，可靠地检出所需要的分析信号，获得有用的分析信息，并以所需要的形式记录下来和显示。

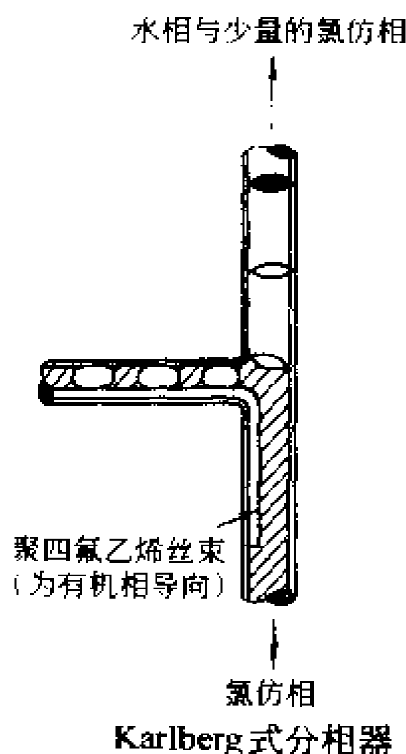
分析信号滤波 filtering of analytical signal 按照某种规则或要求，从分析信号中除去噪声和干扰组分以提取有用分析信息的过程。滤波是一种处理分析信号的常用技术和方法，滤波的方法有光滤波法、电子滤波法和数字滤波法等。

分析信号平滑 smoothing of analytical signal 减小和消除分析信号中随机起伏波动的一种措施。常用的平滑方法有邻域平均法、中值法和众数法。通过分析信号平滑可以提高信噪比。

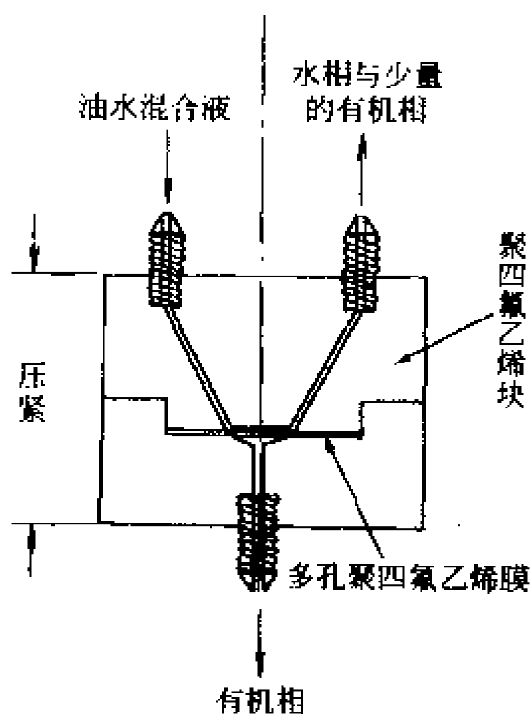
分析信号求导 differentiation of analytical signal 分析信号以响应值的导数形式输出。求导是数据处理的基本方法之一，通过求导，谱峰变得更尖锐，可以提高谱峰的分辨率。但随着导数阶数的增加，在谱峰变得尖锐提高分辨率的同时，原谱的基本特点逐渐消失。

分析型色谱仪 analytical type chromatograph 用于样品中各组分的分离及其物质组成和含量分析的色谱仪器。其特点是柱容量小，分离效率和检测灵敏度高，可用于复杂样品、微量和痕量组分的分析。

分相器 phase separator 又称相分离器。其作用是将完成萃取后的有



Karlberg式分相器

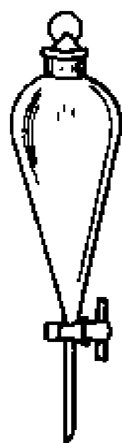


用多孔聚四氟乙烯膜的分相器

机相和水相有效地分离。有利用密度差原理进行分离的T型管式，也有利用渗透性能进行分离的膜相分离器，参见上页图。前者结构简单，需插入聚四氟乙烯引线以促进相分离，能使60% ~80%的有机相进入流通池，其余部分让它随水相弃去。后者采用聚四氟乙烯微孔膜进行分相，可使有机相的分离效率达到95%。

分型 typing 用于区分细菌的各个紧密相关的菌株（如显示很小的生物化学和生物学差别的同一种类的菌株）的各种方法。病原性区分为多个"型"，对阐明相应的流行病学是有用的。

分液漏斗 separatory funnel 溶剂萃取分离中，用于不能互溶的液相间分离的玻璃仪器（常见形状如下图）。互不相溶的溶剂组成的溶液因密度不同而分为两相，待两相完全分离时可从底部放出较重相而实现分离。

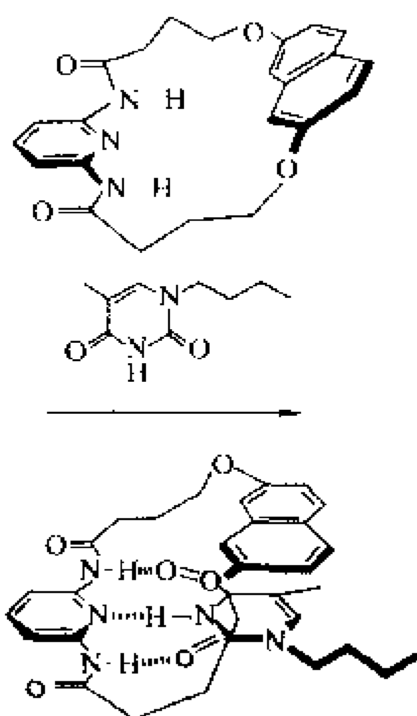


分支环注入技术 split-loop injection FIA 分支环注入技术的含义是将一支注入阀的采样环分成共用一个出口的a和b两部分，在采样位时，既可同时采样品和试剂，分别充满a和b；也可用二者的混合液充满。然后停泵，当阀转至注入位置，启动泵则分支环中的溶液即被载带进入FIA系统。a带追逐b带，然后形成带渗透并完成测定。该技术可用于定量测定共存元素对待测组分的干扰，也适用于进行多组分标准加入。

分子泵 molecular pump 是真空系统中最常用的一种真空泵。主要利用叶片的高速旋转$(2\sim4)\times10^4 r\cdot min^{-1}$，把气体分子从高真空部压缩到低真空部，再由前级泵抽走。分子泵可获得10^{-4} Pa以上的超真空度，其优点是基本无油污染和抽速大，缺点是噪音和振动较大。分子泵不能单独使用，需要外接低真空的前级泵。在其正常工作时，必须维持10^{-1} Pa以上的前级真空。

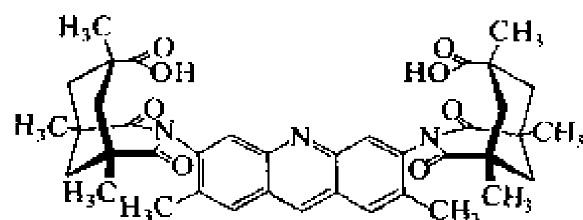
分子电子器件 molecular electronics 利用电子转移将分子识别信息转化为电子信号的分子器件。用分子电子器件替代现有的集成电路，将极大地提高集成度，将为分子计算机的设计揭开新的一页。

分子关节 molecular hinge 是由A. D. Hamilton等设计的一种通过"诱导适应"作用结合客体的主体分子。如图所示，为了有效识别1-丁基胸腺嘧啶，该分子含有可与客体分子形成互补氢键的二氨基吡啶以及能产生π堆积作用的萘环。与1-丁基胸腺嘧啶结合时，萘环会像关节一样旋转34.1°，与胸腺嘧啶环的距离拉近到0.337nm。为了适应客体，结合时主体分子的结构发生了相应的变化，通过"诱导适应"实现识别。



分子光开关 molecular light switch 利用光作用下进行选择性分子识别的一类吸光、发光性分子。这类分子受光激发后不是直接从激发态返回基态，而是发生异构、键的开裂、结合客体等反应。分子的功能通过光可以进行调控，因此称之为分子光开关。这类分子包括光致变色、光致异构、光诱导电荷转移等具有光化学传感功能的分子。如在冠醚、环糊精上结合发光基团后，其对客体分子的识别性能可以通过光进行可逆调控。

分子豁口 molecular cleft 由 Jr. Rebek 等提出的具有多个羧基识别官能团的非环状主体分子，分子呈 U



字形豁口结构（如图所示），U 字底端间隔基团的长短、性质可以根据需要选择，如使用芳香环可以提供与客体分子额外的 π 堆积作用。

分子活化分析 molecular activation analysis；MAA 利用活化技术在分子水平上研究元素化学行为的核化学分析法。它将传统的活化分析与特效的前处理手段（高速离心、凝胶电泳、凝胶色谱、离子交换、透析、逐级溶解等）相结合，既具有活化分析灵敏度高、精密度和准确度好、基体效应小、超微量取样和多元素同时测定的优点，又可以给出元素的化学形态。目前主要用来研究生物必需元素或有毒元素在环境中的化学形态，微量元素在细胞内或亚细胞组分中的分布、存在的形态及其与蛋白质、酶、核酸等生物大分子的作用，微量元素在环境和生物体之间、生物体内各器官与体液之间的迁移转化等。参见活化分析条。

分子剂量 molecular dosimetry 利用生物大分子结构和功能的改变作为指标，可以判断与之作用的其他分子发生一定效应时的量。通常应用于环境诱变和化学致癌等研究领域中，指 DNA 或基因受化学物攻击后形成多种形式的永久性损伤、加合物和突变，通过测定它们的类型和发生频率等，可得出分子剂量。分子剂量与接触剂量不同，前者反映了一个化学物真正起到生物学效应的剂量；后者则不是。故分子剂量对于环境因子危险性评估具有重要意义。

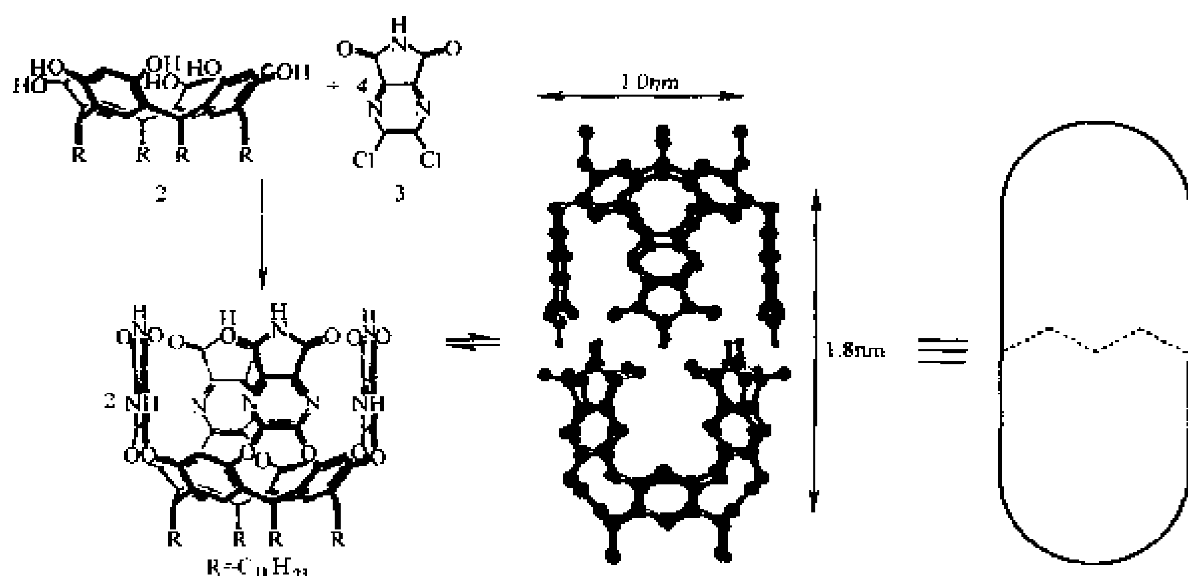
分子间氢键 intermolecular hydrogen bond 氢键是氢原子同时和两个电负性大而半径较小的原子（如 F、O、N 等）结合所形成的一种特殊的原子间作用力。氢键表示的是 X-H…Y的整体结构，其键长是指 X 到 Y 间的距离，其键能一般在 $40kJ \cdot mol^{-1}$以下，比通常的化学键能小得多，比范德华力稍大，具有明显的饱和性和方向性，但与共价键相比，这种饱和性和方向性又不那么严格，可在相当大的范围内变化。氢键可在分子间形成，称为分子间氢键，也可在分子内形成，称为分子内氢键。红外光谱法是证明一个体系是否存在氢键最有效的方法之一。

分子间相互作用力 interaction force between molecules 当一个分子周围有另外分子存在时，它的行为要受到相邻分子吸引力和排斥力的影响。这种影响就是分子间相互作用。分子间相互作用分为物理作用和化学作用。前者无新化合物生成，作用能较弱（约 $0 \sim 15kJ \cdot mol^{-1}$），无方向性和饱和性。后者的作用能较强（$200 \sim 400kJ \cdot mol^{-1}$），有新物质生成，且有方向性和饱和性。分子间相互作用可由相互作用势能或分子间力来表征。当两个球形对称的分子 a 和 b 相距无限远时，它们之间的相互作用可忽略不计。当对体系作功使此两分子相互接近，达到某距离 r 时，它们之间的总能量增加了附加的分子间相互作用势能 U_r。U_r 与 a、b 分子结构有关，同时还与 a、b 分子对称中心的距离 r 有关。分子间相互作用势能 U_r 在数值上等于将这两个分子从无限远处推进到相距 U_r 处时所需做的功，因而分子间相互作用力为相距 r 处两个分子间的作用力，习惯上规定相互排斥力为正，相互吸引力为负。分子间相互作用力是各种分离过程的推动力。

分子胶囊 molecular capsule 分子自组装形成的超分子结构的一种，因其形状如同胶囊而得名。如图所示的是由 Jr. Rebek 合成的分子胶囊。由于其尺寸固定，可以识别 E 型二苯乙烯、Z 型酰替苯胺以及尺寸大小合适的两个小分子形成的超分子等(见下页图)。

分子扩散 molecular diffusion 溶质分子沿着色谱柱轴向的扩散效应。当载气带着溶质分子进入色谱柱中时，在柱内形成一个高浓度带，由于柱内存在纵向的浓度梯度，引起了溶质分子的扩散，使谱带变宽。在气相色谱中，分子扩散与溶质在气相中的扩散系数、载气线速以及柱填充情况有关。在液相色谱中，由于液体扩散系数较气体小 $10^4 \sim 10^5$ 倍，所以溶质在液相中的这种扩散可忽略不计。

分子离子 molecular ion 在离子化过程中，分子内的化学键未断裂，只是由于失去电子或附加电子而产生的离子。通常用 M^{+} 及 M^{-} 表示，它们是与分子量相关的离子。对于单电荷离子，分子离子的质荷比在数值上等于该化合物的分子量。



分子胶囊的结构图

分子量分布 molecular weight distribution 高分子聚合物中不同分子量的同系物所占的质量和数量。高分子聚合物的分子大小是不均一的，是由不同分子量的同系物组成的混合物，不同的分子量有一个分布，分布的形状则受各种聚合条件及聚合方式的影响。高分子聚合物的分子量分布状况可以用分子量分布曲线表示。

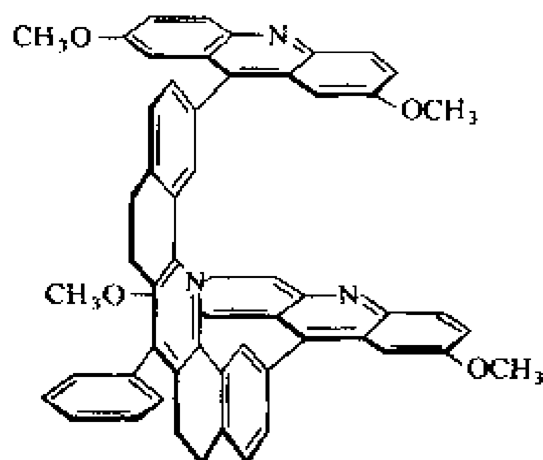
分子量检测器 molecular weight detector 直接或间接检测被测物分子量大小的检测器。在凝胶色谱中用于测定高分子化合物分子量大小和分子量分布，常用的分子量检测器是黏度检测器和光散射检测器，因为高分子溶液的黏度和其溶质微粒的光散射强度都与高分子化合物的分子大小有关。

分子内电荷转移 intramolecular charge transfer; ICT 含有吸、推电子取代基的杂原子分子 π-电子体系受光激发后，由于激发态极性大于基态，因此分子内电荷产生分离，发生分子内电荷由推电子部分向吸电子部分转移的状态（ICT 态）。ICT 态的形成与溶剂特性密切相关，若溶剂极性大，则 ICT 态稳定，是最低能级，观察到的荧光是 ICT 态发光；若是非极性溶剂，则不会发生电荷转移。因此分子内电荷转移荧光的发射波长随溶剂极性增大而发生红移。许多荧光分子都会产生 ICT 态，ICT 态在分子识别中应用广泛。

分子内氢键 intermolecular hydrogen bond 见**分子间氢键**条。

分子气体激光器 molecular gas laser 顾名思义是激光介质为气体分子的激光器，最重要的是二氧化碳激光器，输出波长为 10600nm，且输出功率很高，可以得到几百瓦乃至更高的激光功率。常用作激光加工的光源。

分子钳 molecular tweezer 形似工具钳的一种人工合成的受体分子。如下图所示，两个吖啶环相距约0.7nm，通过π堆积以及空间尺寸的匹配作用可以结合相应的客体分子。类似地，钳的两边可以是电子供体基团，遇吸电子性基团时还会产生额外的电荷转移相互作用，形成三明治状主客体复合物。这种预组织的分子识别方式往往具有较高的识别能力和识别选择性。



分子散射 molecular scattering 散射的一种，与丁达尔散射不同，它指的是在均匀、纯净的介质中所观察到的微弱的散射。

分子筛 molecular sieve 气-固色谱中常用的一种固体吸附剂，它是一种具有与某些分子尺寸相当的多孔穴的结晶型硅铝化合物，由J. W. Mcbain命名。一般化学表达式为：$M_{2/n}\cdot Al_2O_3\cdot xSiO_2\cdot yH_2O$，其中M为金属阳离子，$n$为其价态，$x$为硅铝比，$y$为饱和水分子数。当被分离物质的分子体积小于分子筛孔穴通道时，便进入通道而被吸附，否则不被吸附，因而混合物组分彼此得到分离。分子筛具有非常大的比表面积（$300\sim1000m^2\cdot g^{-1}$），因此具有很强的离子交换性、吸附性以及催化性。由于分子筛对水有很强的亲和力和吸附容量（是高效干燥剂），吸水后的分子筛会失去活性，所以在使用前必须活化，一般在550℃下处理4～5h。

分子筛色谱 molecular sieve chromatography 又称凝胶色谱。是以分子筛材料作固定相，利用不同大小的分子向筛孔内扩散的程度不同，将溶质按分子量大小进行分离的液相色谱方法。参见凝胶色谱法条。

分子识别 molecular recognition 某给定受体（或称为主体）对客体分子选择性结合并产生某种特定功能的过程。分子识别包括主客体间几何尺寸、形状上的相互识别以及分子间氢键、π堆积、电荷转移等分子间非共价相互作用的识别。两个或数个分子间的分子识别是形成超分子的第一步。

分子吸附 molecular adsorption 样品以分子状态吸附在固定相表面。在液相色谱中，通常用来与样品以离子交换、分配等机理保留在固定相中相区别。

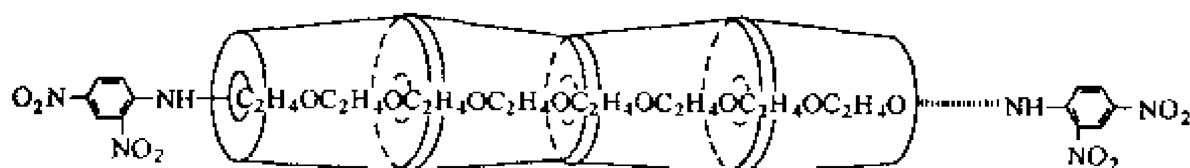
分子吸收 molecular absorption 分子对辐射的吸收。在原子吸收光谱中，火焰燃烧产生的分子，如OH、CH、CN、C_2、NH、CO、H_2O等，在相当宽的波段区有分子吸收带，OH在309～330nm和281～306nm、

CH 在 387 ~ 410nm，C_2 在 468 ~ 474nm 有分子吸收带。试样在原子化过程中形成的分子，产生分子吸收、碱金属卤化物在 200 ~ 400nm 有分子吸收带，其中 NaCl 在 192nm 和 240nm 出现两个吸收峰，硫酸盐和磷酸盐在 <240nm 区有强的分子吸收。分子吸收具有波长、时间和温度特性，利用这些特性可以避免和消除分子吸收对测定的影响。分子吸收形成宽带背景，导致测定结果偏高，在实际分析中需对它进行校正，方法有双线法、连续光源法、塞曼效应法和自吸收法。

分子吸收光谱 molecular absorption spectroscopy 物质分子吸收光能后从基态或某一低能态跃迁到另一高能态所产生的光谱。分子具有转动能 E_r、振动能 E_v 和电子能量 E_e，分子在某一瞬间的总能量 $E = E_r + E_v + E_e$。分子吸收光谱包括分子电子光谱、分子振动光谱和分子转动光谱。分子中同一电子能态、同一振动能态内不同转动能级间跃迁产生分子转动光谱，位于远红外光谱区；同一电子能态内不同振动能级间跃迁产生分子振动光谱，位于中红外光谱区；电子能级间的跃迁产生分子电子光谱，位于紫外-可见光谱区。若电子跃迁的同时伴随着振动和转动能态的变化，则可以得到谱带的精细结构。分子吸收光谱反映了分子结构的特征。

分子相干散射 coherent scattering of molecular 见**相干散射**条。

分子项链 molecular necklace 通过模板合成得到的形似项链的一种纳米结构。如将聚乙二醇（PEG）与环糊精作用，则一条长链的 PEG 分子可以串上多个环糊精分子，就像项链一样。然后在 PEG 的两端用不能穿过环糊精的大基团进行修饰，则环糊精分子不能脱落，得到稳定的分子项链。如下图。



分子项链图

分子印记法 molecular imprinting method 将待测的目标分子作为模板，与含有对模板分子具有特定识别位点的功能单体进行聚合反应，则功能单体通过分子间相互作用或通过容易开裂的共价键与模板分子一起形成聚合物，然后用适当溶剂抽提出模板分子，则在聚合物的表面留下了对模板分子的形状、大小、功能团具有记忆功能的识别位点，这种聚合物称为分子印记聚合物。分子印记聚合物一般对模板分子具有很高的识别选择性，多用作色谱固定相、人工酶、传感器以及人工抗体等。该法一般不需要严格的分子设计，所得聚合物与天然酶相比稳定性好，抗化学腐蚀。

分子置换法 molecular replacement 晶体结构测定中破解相角问题的一种帕特逊方法。向量空间中的帕特逊峰由两部分组成：分子内部的原子间向量峰，称为自身向量，一般都靠近原点；分子之间的原子间向量峰，称为交叉向量，一般离原点较远。显然，分子在晶胞中的平移不会影响自身向量，而分子的旋转对自身向量只影响其位置，而不会影响其到原点的距离。如果一个已知化合物的结构与待测化合物的结构相似，利用已知结构，通过自身向量确定一个旋转矩阵，用交叉向量确定平移矩阵，使根据变换后的结构计算而得的帕特逊函数与实测的帕特逊函数尽可能地接近，就可以得到供进一步修正用的初始结构模型。

分子自组装 molecular self-assembly 具有识别位点的分子彼此靠近时会寻找最安定的位置，其结果是在弱的分子间力的作用下自发组合形成了一类结构明确、稳定、具有某种特定功能的分子集合体或超分子结构。由于是分子自身的排列组合所致，因此称为分子自组装。DNA 双螺旋就是核酸碱基对在氢键作用的诱导下自组装的结果。分子自组装在生物体系中十分普遍，近年人们将这种方式用于人工体系中，使多个小分子依靠分子间弱的作用力彼此识别，实现自组装，使其具有超越单个分子功能的高次结构即超分子。分子自组装是超分子化学研究的重要内容。

分子自组装固定法 molecular self-assembling immobilization 在单晶金电极表面，先修饰一层硫醇类化合物，这是通过化学键的相互作用进行自组装构成的单分子层，然后再通过自组装的方法将媒介体和酶一层一层地修饰于电极上，构成传感器的方法。该方法能使酶进行直接电子转移，已在生物传感器的研究中得到应用。如以胱氨酸或半胱氨酸为形成的自组装膜，通过缩合反应键合上媒介体（如二茂铁、醌类等）和酶可构成测葡萄糖、谷胱甘肽、胆红素、苹果酸等的多种生物传感器。

酚二磺酸比色法 phenol-2,4-disulphonic acid colorimetry 一种测定硝态氮的方法。酚二磺酸在无水情况下与硝酸作用生成 $C_6H_2OH(NO_2)_3$，后者在碱性条件下产生分子重排，生成黄色的络合物 $C_6H_2(NO_2)_3ONH_4$，此法具有较高的灵敏度，测定硝态氮的范围为 $0.05 \sim 9\mu g \cdot g^{-1}$。待测液中亚硝酸根在 $1mg \cdot L^{-1}$ 和氯化物在 $30mg \cdot L^{-1}$ 以下时，对测定无影响。

酚醛离子交换树脂 phenolic ion exchange resin 以苯酚类缩合物为基质的离子交换剂。在离子色谱中用作固定相。

酚指数测定法 determination of phenol index method 简称 FDA 法。FDA 是美国食品药物管理局（Food and Drag Administration）的缩写，它是美国食品药物管理局测定消毒剂、杀菌剂或防腐剂等物质的方法。

丰核 abundant nuclei 同位素丰度大的核素。在核磁共振中，磁性强

的丰核的相对可接受度比较大，较容易研究，最常见的丰核的核素有^{1}H，^{14}N，^{19}F，^{31}P等。其中^{14}N是电四极核，尽管^{14}N丰度很高，但通常仍用非电四极核^{15}N进行研究更方便。参见**磁性核的相对可接受度**条。

封闭X射线管 X-ray tube 一种能产生X射线的真空管，是最常用的X射线光源。由一个发射电子的阴极和一个接受电子的阳极所组成。阴极一般由螺旋状的钨丝所组成，在一定的加热电流下，可产生热电子，这些热电子在施加于阴阳极之间的几万伏高压的加速之下，高速飞向阳极。阳极一般由铜或钢制成，面向阴极的一面称之为靶，常用的靶材有铜、钼、铁、铬、钨、银等金属。当高速飞行的电子撞到靶面上时，除了产生热能外，电子的减速和对靶材的一次激发，可以产生连续的X射线和靶材的特征X射线，这些X射线通过一个很薄的铍窗射出管外。为了避免靶的过热，通常需要用循环水冷却阳极。

封闭试验 test blocking 抗原与抗体间的特异性反应被首先加入的特异性相同而生物学活性不同的抗体所封闭的试验。如将不完全抗体加入红细胞的悬液中，可阻止这些细胞与后来加入的凝集素发生凝集反应。

封尾 endcapping 用氯化三甲基硅烷等试剂与硅胶表面的残留硅醇基反应，将残留硅醇基封锁起来的化学处理过程。经封尾处理的硅胶基质固定相减小了溶质与固定相之间的次级相互作用，使分离效果有明显改善。

峰半高宽 full width at half maximum; FWHM 是峰的背景以上峰高一半处与基线平行的峰宽度。通常用来描述峰的展宽效应，也是谱仪能量分辨率的一个重要指标。FWHM与很多因素有关，如样品表面的光洁度、化学价态的变化、通能变化等。

峰背比 peak to background ratio 在原子吸收光谱分析中，是指分析线峰高或峰面积与背景两者吸光度之比；在原子发射光谱分析中，是指分析线与背景两者强度之比。它决定了一个分析方法的实际可测定的下限含量或浓度。

峰电流 peak current 在线性扫描极谱法、循环伏安法以及类似的方法中，在一次扫描时由于物质的还原或氧化而产生的电流峰的最大值。

峰电位 peak potential 在线性扫描伏安法、循环伏安法及类似的方法中，出现峰电流时，指示电极的电位。

峰度 peakness 又称峰态系数(kurtosis)。概率密度分布曲线在平均值处峰值高低的特征参数，以b_k表示。

$$b_k=\frac{n\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^4}{[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2]^2}$$

式中，x_i为测定值；$\bar{x}$为算术平均值；n为测定值的数目。正态分布的峰度为3。$b_k<3$，表明分布曲线具有不足的峰度，测定值在平均值附近的分布比正态分布更分散；$b_k>3$，表

明分布具有过渡的峰度，测定值在平均值附近的分布比正态分布更集中。可用峰度来检验测定值分布的正态性。

峰-峰宽度 peak to peak linewidth 因为ESR的能量吸收谱线都比较宽，所以为了提高灵敏度，在测试ESR谱图时一般都记录一次微分曲线。在一次微分曲线中通常用两峰值（即峰尖与峰谷）间的宽度表示线宽，这就是峰-峰宽度。峰-峰宽度与平常说的吸收曲线的半高宽是有区别的。

峰高 peak height 从色谱峰的顶点到基线之间的垂直距离，以 h 表示。峰高的物理意义是当组分随载气进入检测器时，检测器的输出信号达到最大值，也即在色谱图上峰高相应于组分的最大浓度值。参见**保留时间**条。

峰高测量法 peak height measurement 石墨炉原子吸收光谱分析中一种测量吸收信号的方法。若原子化速度很快，总原子化时间 τ_A 很短，而原子在吸收区的平均停留时间 τ_R 足够长，在完全原子化的瞬间 $t=\tau_A$，分析区内的原子数达到峰值，这时的原子数 N_p。

$$N_p = N_0 \frac{\tau_R}{\tau_A}(1 - e^{-\frac{\tau_A}{\tau_R}})$$

式中，N_0 是试样中被测元素的原子数。当 $\frac{\tau_A}{\tau_R} \leqslant 1$，$1 - e^{-\frac{\tau_A}{\tau_R}} \approx \frac{\tau_A}{\tau_R}$，则 $N_p \approx N_0$，在这种情况下，即使原子化时间 τ_A 和自由原子在吸收区的平均停留时间 τ_R 有所变化，峰值吸收原子数 N_p 近似等于试样中被测元素的总原子数 N_0。若自由原子在吸收区的平均停留时间 τ_R 很短，$\tau_A > \tau_R$，则测得的峰值吸收信号将随 τ_A、τ_R 而改变，依实验条件而变化。

峰面积 peak area 是指色谱峰曲线与基线之间所包围的面积，用 A 表示。在色谱定量分析中峰面积是一个重要参数。在大多数情况下，被分离组分的含量与所测定的峰面积成正比，因此正确测量峰面积是定量分析的基础。参见**峰面积测量法**条。

峰面积测量法 measurement of peak area 广泛用于色谱分析和原子吸收光谱分析的一种测量方法。在色谱分析中，峰面积的准确测量是色谱定量分析的关键。采用自动积分的方式，可以真实地测量峰面积的大小，测量精度较高。人工测量时可采用近似的方法，对于对称色谱峰峰面积是

$$A = 1.065 \times h \times 2W_{1/2}$$

式中，h 为峰高；$W_{1/2}$ 为半峰宽。对于不对称色谱峰

$$A = h\frac{1}{2}(W_{0.15} + W_{0.85})$$

式中，$W_{0.15}$、$W_{0.85}$ 分别代表峰高0.15、0.85处的峰宽。对不完全分离峰峰面积的测量可采用垂直切割法和切线切割法，对于特别不规则的峰，可采用剪纸称重法测量峰面积。参见**垂直切割法**条、**切线切割法**条及**剪纸称量法**条。

在石墨炉原子吸收光谱分析中，若在原子化的全部时间内原子停留吸收区内，而积分时间足够长，测得的积

分原子数

$$N=\int_0^{\tau_i}N_t\mathrm{d}t\approx N_0\tau_R$$

式中，τ 是积分时间；N_t 是任一时刻 t 进入吸收区的原子数；N_0 是试样中被测元素的原子数；τ_R 是自由原子在吸收区的平均停留时间。在这种情况下，N 与总原子化时间无关，只要被测元素全部原子化和 τ_R 保持不变，即使原子化条件和试样组成发生变化，测得的原子吸收信号仍保持不变，只与试样中被测元素的原子数 N_0 有关。因此，峰面积测量法（积分法）在原子吸收光谱分析中获得了广泛的应用。

峰面积校正 calibration of peak area 在毛细管电泳中，溶质通过毛细管的迁移速度是电泳力和电渗力的函数，不同的组分以不同的速度通过检测窗口。移动较快的组分通过检测窗口所需的时间较短，反之则较长。在这种情况下，为了获得准确的峰面积数据必须用迁移时间予以修正。校正后的面积等于直接测得的面积除于该组分的迁移时间。

峰匹配法 peak matching 是测定离子精确质量的一种方法。精度可达百万分之一到百万分之十。根据扇形磁质谱仪的基本公式：$\frac{m}{z}=\frac{KB^2}{V}$，当 B^2 不变时，质量分别为 m_1 和 m_2 的两个离子有如下关系：$m_1:m_2=V_1:V_2$。在离子接收狭缝前装上一对偏转电极，并在电极上加一个和示波器 x 轴相同的扫描电压，将质谱信号加到示波器 y 轴上，当加速电压在 V_1 和 V_2 之间交替变化时，示波器屏幕上就会交替出现质量为 m_1 和 m_2 的两个峰，准确测定 V_1 和 V_2 比值，在仪器分辨率足够高时，利用已知 m_1 离子的精确质量，即可算出 m_2 的精确质量。但是要求两个离子相对质量差不超过 10%。

峰容量 peak capacity 对给定的色谱体系和操作条件，在一定的时间内，最多能从色谱柱中洗脱出达到足够分离度的色谱峰（组分）的个数。如果柱的分离效率高，所获得的色谱峰尖锐，则该柱的峰容量就大。因此，影响柱效的因素都将影响峰容量。

峰值吸收测量法 method of peak absorption measurement 通过测量原子吸收线轮廓中心波长的吸收系数确定试样中被测元素含量的方法。在使用锐线光源和实验条件一定的情况下，峰值吸收系数 k_0 与试样中被测元素的原子数成正比

$$k_0=\frac{2}{\Delta\nu_D}\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\frac{\pi e^2}{mc}f_{oi}N$$

式中，$\Delta\nu_D$ 是多普勒宽度；e 是电子电荷；m 是电子质量；c 是光速；f_{oi} 是吸收振子强度，定义为每个原子能吸收特征辐射的平均电子数，是由跃迁矩所得到的吸收强度的理论量度；N 为吸收光程上单位体积内能吸收频率为 ν 特征辐射的原子数目。在给定的实验条件下，蒸气相中原子数 N 与试样中被测元素的含量成正比，因此，通过测量峰值吸收系数就可以确

定试样中被测元素的含量。

蜂蜜蛋白质碳同位素比值测定 determination of carbon isotope ratio of protein in honey 蛋白质碳同位素比值的测定，对于蜂蜜的品质来说具有极为重要的意义。如果是不掺假的蜂蜜，那么蜂蜜中蛋白质的碳同位素之比，即$^{13}C/^{12}C$应为22‰～28‰，而通常掺有高果糖玉米糖浆和甘蔗糖浆的蜂蜜，其碳同位素之比，即$^{13}C/^{12}C$仅为10‰～20‰，所以，通过对蜂蜜蛋白质碳同位素比值的测定，可以有效地判定蜂蜜中是否掺有高果糖玉米糖或甘蔗糖浆。具体检测步骤是：将蜂蜜样品封入锡囊置于自动进样器上，在氧气脉冲的存在下将锡囊送入1000℃氧化炉。锡囊瞬时灼烧熔化，温度高达1800℃，蜂蜜样品灼烧生成CO_2、N_2、NO_x和H_2O，其中CO_2与其他杂质分离后，经色谱柱进入质谱仪进行同位素分析。

缝管捕集-原子吸收光谱法 slotted tube trapping-atomic absorption spectrometry 一种在火焰中预富集被测元素以提高火焰原子吸收光谱分析灵敏度的技术。将一根石英或金属捕集管置于预混合型火焰原子化器的火焰中，当由雾化器喷入试液时，待分析物被冷凝在水冷或气冷的捕集管的外表面。将捕集管快速升温，使凝聚在管外表面的分析物迅速蒸发和原子化，从而在测量光路中形成很高的原子密度，产生高的吸光度，达到提高测定灵敏度的目的。

缝式燃烧器 slot burner 一种具有缝型燃烧口的燃烧器。常用的是单缝燃烧器，此外，还有双缝和多缝燃烧器。它与预混合室、喷雾器共同构成预混合型原子化器。用大块不锈钢或钛钢制作，以防止燃烧缝在高温下变形。燃烧缝的宽度和长度取决于火焰的燃烧速度，燃烧速度快的火焰，需使用较窄的缝宽和较短的缝长。对于空气-乙炔火焰，燃烧缝长为100mm，用于氧化亚氮-乙炔火焰，缝长为50mm，缝宽通常都多为0.5mm。缝形燃烧器的优点是，燃烧稳定，火焰基本上不受气流扰动，产生层流火焰，噪声小，有效吸收光程长，可以获得较高的灵敏度。

佛尔哈德法 Volhard's method 一种沉淀滴定法，采用Fe^{3+}（铁铵矾）作指示剂利用沉淀反应，用KSCN或NH_4SCN标准溶液滴定Ag^+的方法。当AgSCN定量沉淀后，稍过量的SCN^-与Fe^{3+}生成红色配合物$FeSCN^{2+}$表示滴定终点。此法还可用于Cl^-、Br^-、I^-、CN^-等离子的测定（加入一定量但又过量的$AgNO_3$与这些离子反应后，滴定剩余的Ag^+）。

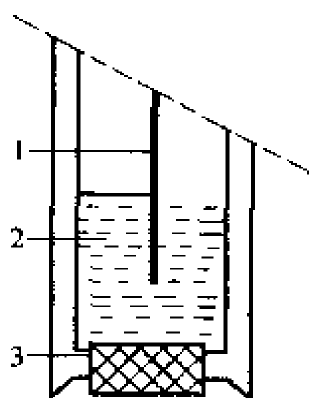
夫劳霍弗线 Fraumholfer line 钠原子吸收光谱线的早期称谓。1802年，伍朗斯顿（W. H. Wollaston）发现了太阳光谱中的黑线，但没能给予满意的解释。1817年夫劳霍弗（J. Fraunhofer）在黑屋内将一块火石玻璃棱镜放置在经纬仪前，让太阳光通过小缝投射到棱镜上，用经纬仪上的望远镜观察光谱时再次观察到了很

多条黑度不等的黑线密集在光谱上，其中D线是由紧靠在一起的两条最强的黑线组成的，用字母D予以标记。当用光照明狭缝时，未能观察到这些黑线，只看到一些位置与太阳光谱中D黑线相同的亮线，并测定了未分辨的D线的平均波长为0.0005887mm，由于当时不了解产生这些暗线的原因，于是就将其称为夫劳霍弗线。1820年布鲁斯特（D. Brewster）首先对夫劳霍弗线产生的原因做出了基本上是正确的解释，认为夫劳霍弗线是由于太阳外围大气圈对太阳光吸收的结果，后来的本生（R. Bunsen）和克希荷夫（G. R. Kirchhoff）设计了煤气灯，用铂丝将盐引入本生火焰中，火焰呈现出不同的颜色，认为火焰的颜色是与元素而不与化合物相联系的，是某一元素的特征，是鉴定元素最灵敏和最简单的方法。这一发现，标志着发射光谱化学分析的诞生。

伏安法 voltammetry 使用固体电极或表面静止的电极，如悬汞电极、玻璃碳电极、金属电极等的电化学方法。其实，极谱法和伏安法纯属习惯称呼，极谱法来源于滴汞电极上的极化曲线，而伏安法来源于电流-电势曲线，两者在本质上并无区别。

伏马毒素 *fumonisins* 真菌镰刀菌属串珠镰刀菌素（*moniliform*）生成的一种真菌毒素，多存在于玉米及玉米制品中，其含量一般超过1μg·g^{-1}。在大米、面条、调味品、高粱、啤酒中也有较低浓度的伏马毒素存在。它能使马产生脑白质软化症、神经性中毒而呈现意识障碍、失明和运动失调，甚至造成死亡；对猪产生肺水肿、对人产生食管癌。伏马毒素检测方法主要有免疫亲和柱-荧光法、免疫亲和柱-HPLC法、毛细管电泳法、液相-质谱法。

氟离子选择电极 fluorine ion-selective electrode 一种测定微量氟离子（F^-）的离子选择性电极。其结构如下图所示。由纯的或掺杂了Eu^{3+}（增加导电性）的氟化镧（LaF_3）单晶制成的传感膜封于塑料管一端，管内充入内参溶液并用银-氯化银电极作内参电极作组成。氟离子选择电极测定F^-的选择性极高，几乎没有干扰，并能测定溶液中$10^{-1}\sim10^{-6}mol\cdot L^{-1}$浓度的$F^-$。但使用时需将被测溶液的pH值控制在pH=5～8.5的范围，以消除高浓度H^+或OH^-的干扰。氟离子选择电极现已广泛应用于环境水体等F^-的测定。



氟离子选择性电极
1—银-氯化银内参比电极；
2—内参比溶液（NaF-NaCl溶液）；
3—氟化镧单晶膜

浮聚法 flotation method 利用相对密度大于蠕虫卵和原虫包裹的液体，使虫卵或包裹上浮，浓集于液面，其效果优于沉淀法。常用的有饱和盐水浮聚法和硫酸锌离心浮聚法。

浮选 flotation 一种重力分离方法。它借助于上升的气泡流将水溶液中的物质（离子、分子、胶体、金属微粒和悬浮物等）选择性地漂浮到溶液表面的过程。物质能否被浮选，取决于其表面润湿性，疏水性物质容易吸附在气泡上漂浮起来，而浮选亲水性物质，一般要预先使其与适当表面活性剂结合转变成疏水性物质才能实现浮选。依浮选方式不同分为沉淀浮选、离子浮选、溶剂浮选等。此技术已广泛用于矿石中有价值矿物的富集。分析化学中据此提出浮选富集法、浮选光度法。

浮选光度法 flotation spectrohpotometry 将浮选分离、富集和光度测定相结合的分析法。分为溶剂浮选和泡沫浮选两类。前者靠有机溶剂将水相试液中待测物带到两相界面上，经分离和除去溶剂后，再把待测物溶于少量的另一种溶剂中进行光度测定。例如，在 $[H^+]=0.45mol\cdot L^{-1}$ 介质中，用环己烷作浮选剂浮选 Hg(Ⅱ)-I^--亚甲基蓝配合物使之与水相分离，蒸发除去环己烷，残余物溶于少量甲醇中进行光度测定，$\varepsilon_{670nm}=1.5\times10^5L\cdot mol^{-1}\cdot cm^{-1}$。后者使用适当的起泡剂（如表面活性剂），使待测组分以离子形式或配合物形式随泡沫一起与原试样溶液分离，随后加入适当的消泡剂消泡后进行光度测定。例如，在 pH = 7 条件下，以阳离子表面活性剂溴化十六烷基三甲铵（CTMAB）作起泡剂浮选 CN^--氯胺T-异烟酸吡唑啉酮配合物，然后用乙醇为消泡剂，可用于 CN^- 的测定，$\varepsilon_{638nm}=5\times10^4L\cdot mol^{-1}\cdot cm^{-1}$。

符号附加法 symbolic addition method 晶体结构测定中破解相角问题的一种直接法。选出定义原点的强衍射（一般是三个），指定其相角，对于非中心对称的空间群一般还需要指定一个衍射的相角，定义绝对构型，再加上少数几个强衍射以 a、b，…符号作为各自的相角，构成起始套。利用三重积符号关系式或 Σ_2 关系式以及自洽的原则逐步推导出其他衍射的相角和确定各个符号的实际相角值，不断扩充已知相角的衍射数目，直到能够得到足以辨认的 E 图时为止，解析 E 图，即可得到供进一步修正用的初始结构模型。

符号检验 sign test 一种非参数检验方法。使用这种检验方法，对样本是否来自正态总体没有严格规定。它常用来检验两平均值的一致性。若有 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 和 $y_1,y_2,\cdots,y_n$ 两组来自相同但未知分布的样本值，出现 $x_i>y_i$ 或 $x_i<y_i$ 的几率是相同的，概率各为 1/2，出现 $x_i>y_i$ 或 $x_i<y_i$ 的次数 C 是一个随机变量。若将 $x_i=y_i$ 的情况不计，令出现 $x_i>y_i$ 的次数为 n_+，出现 $x_i<y_i$ 的次数为 n_-，令 $n=n_++n_-$，$C=\min(n_+,n_-)$。如果由样本值得到的 C 比符号检验临界值

表中约定显著性水平 α 的临界值 C_α 还小，表明两平均值之间有系统误差。

当 n 很大时，C 遵从平均值为 $\frac{n}{2}$、标准偏差为 $\sqrt{\frac{n}{4}}$ 的正态分布。因此，可利用正态分布性质来检验两平均值。检验统计量是

$$t = \frac{C - \frac{n}{2}}{\sqrt{\frac{n}{4}}}$$

在约定显著性水平 $\alpha = 0.05$，t 落入 [-1.96，1.96] 区间的概率为 0.954，若由测量值计算的 t 落入该区间之内，表明两平均值之间没有系统误差，否则，判为有系统误差。

辐射 radiation 以射线、电磁波或粒子发射的形式通过空间或介质发射、传播能量的现象。

辐射通量 radiant flux 辐射源（如光源）向空间各方向发出各种波长的辐射，单位时间内通过辐射源一个元面积的所有波长辐射的能量称为该元面积的辐射通量，具有功率量纲，单位为瓦特。

辐射跃迁 radiative transition 原子获得能量后，电子由低能级向高能级跃迁。在一般情况下，激发态原子很快（10^{-8}s）由高能级向低能级跃迁，释放出光子，称为自发发射或辐射跃迁。参见**非辐射跃迁**条。

辐照损伤 radiation damage 由于粒子束（光子，电子束）的辐照而使样品表面所受到的损伤。如电子束打在样品上，从样品原子中打出轨道电子而引起电离，由此所产生的力可以引起化学键的断开，因而使样品发生变化。它们也可以碰撞原子核，当电子束能量足够大时，能产生核位移。减少样品上的电子束流密度是减少辐照损伤的方法。在 XPS 分析中经常出现 X 射线对样品表面的损伤，主要有光还原以及光辐照分解效应。

辅酶 coenzyme 对于酶活性必需的辅因子。有辅酶 A，烟酰胺腺嘌呤二核苷酸（NAD），黄素腺嘌呤二核苷酸（FAD）和磷酸吡哆醛等。

辅助电极 auxiliary electrode 又称对电极（counter electrode）。在不同的学科领域，辅助电极的含义不同。在电分析化学的三电极体系中，是指与研究电极组成一个让电流畅通的回路的电极，通常用惰性金属制成。而在如原子发射光谱等分析中，辅助电极是指与自电极或支持电极组成对电极的另一电极。参见**电极**条。

腐蚀 corrosion 由于材料与环境间的物理、化学作用使材料的性能发生变化，导致材料、环境或由它们作为组成部分的技术体系的功能受到损伤。高分子材料的被腐蚀也称之为老化。

腐蚀产物 corrosion product 材料被腐蚀剂腐蚀形成的物质，如氧化皮（scale）、铁锈（rust）、铜绿（patina）等。

腐蚀电池 corrosion cell 腐蚀体系中形成的腐蚀反应短路原电池，腐蚀金属是它的一个电极。腐蚀电池工作的基本过程必须包括三个方面：

(1) 阳极过程，金属进行阳极溶解以离子形式进入溶液的同时将等量的电子留在金属上；(2) 阴极过程，溶液中的氧化剂吸收电极上过剩的电子自身被还原；(3) 这两个过程是在同一块金属上或在直接相接触的不同金属上进行且在金属回路中有电流流动。

腐蚀电流　corrosion current　相应于腐蚀电位下的金属阳极溶解电流。

腐蚀电位　corrosion potential　材料在给定的腐蚀体系中的电极电位。

腐蚀环境　corrosion environment　含有一种或多种腐蚀剂的环境。

腐蚀剂　corrosion agent　使给定材料发生腐蚀的物质。

腐蚀深度　corrosion depth　受腐蚀的材料表面上某一点和其原始表面间的垂直距离。

腐蚀速度　corrosion rate　单位时间内材料腐蚀的量，表示方式取决于腐蚀的类型，可采用单位时间内腐蚀深度增加或单位时间内单位面积上材料的失重或增重等来表示。金属发生电化学腐蚀时的腐蚀速度常用电化学腐蚀的电流密度来表示金属单位时间内单位面积上金属的失重。

腐蚀体系　corrosion system　由一种或多种材料和腐蚀环境组成的系统。

腐蚀性　corrosivity　腐蚀环境对材料腐蚀的能力。

负离子　negative ion　带有负电荷的离子。例如，$M^{\dot{-}}$，$[M-H]^-$，$[M+O]^-$等。

负离子化学电离　negative ion chemical ionization；NICI　对于具有卤素或硝基等电子亲和力比较大基团的化合物，捕获一个电子可生成负离子，这些负离子与分子M之间发生质子转移反应生成$[M-H]^-$，这种离子化的方法称之为负离子化学电离法。对电负性高的化合物能得到高灵敏度的分析结果。

负相关　negative correlation　在回归与相关分析中，因变量值随自变量值的增大（减小）而减小（增大）的现象。在这种情况下，表示相关程度的相关系数为负值。

复格子　nonprimitive lattice　按照法国学者A. Bravais提出的准则选出的平行六面体单位格子（晶胞）为复晶胞的晶体点阵。复晶胞的特点是：除了8个顶角上的点阵点之外，平行六面体中还存在着“附加点阵点”，即每个复晶胞中含有点阵点的数目大于1。这些“附加点阵点”可以出现在平行六面体的一对平行平面的面中心，也可以同时出现在平行六面体的3对平行平面的面中心，此外还可以出现在平行六面体的体中心或体对角线上。

复（组）合电极　combination electrode　将参比电极（如饱和甘汞电极）和指示电极（如玻璃pH电极或氟离子选择电极）集于一体的电极。其目的是缩小电极的体积以适应小体积溶液的测量，使用更为灵活。

复合硅酸盐吸附法　macaloid adhesive method　复合硅酸盐是一种黏

土，可以吸附 RNA 酶，利用一定步骤制备的 Macaloid 黏土可以用于去除 DNA 酶中的 RNA 酶。将一定量的 Macaloid 黏土用 pH = 7.6 的 Tris · Cl 处理并加热煮沸后，离心并重新悬浮于 $50mmol \cdot L^{-1}$ Tris · Cl（pH = 7.6）中至终浓度为 $17mg \cdot ml^{-1}$，与待处理的 DNA 酶溶液在 4℃ 的冰水混合浴中混合并使其吸附一定的时间，再通过离心的方法去除黏土，反复多次即可得到无 RNA 酶的 DNA 酶。

复合柱 combined column 又称为组合柱。它包括：用两种或两种以上固定液按不同配比混合后涂渍在载体上填于柱内的柱；两种或两种以上吸附剂混合、涂渍不同固定液的载体按所需比例混合后填充于柱内的柱；不同固定相色谱柱的串联等。在分析含有不同功能团的复杂样品时，往往单一成分的固定相不能满足分离的要求，必须采用多种固定相的组合。

复性 renaturation 核酸或蛋白质由变性状态恢复至变性前状态的过程。变性的 DNA 的两条互补单链在一定条件下重新组合成双链螺旋叫做退火（annealing）。DAN 的变性和复性是分子杂交技术的理论基础。

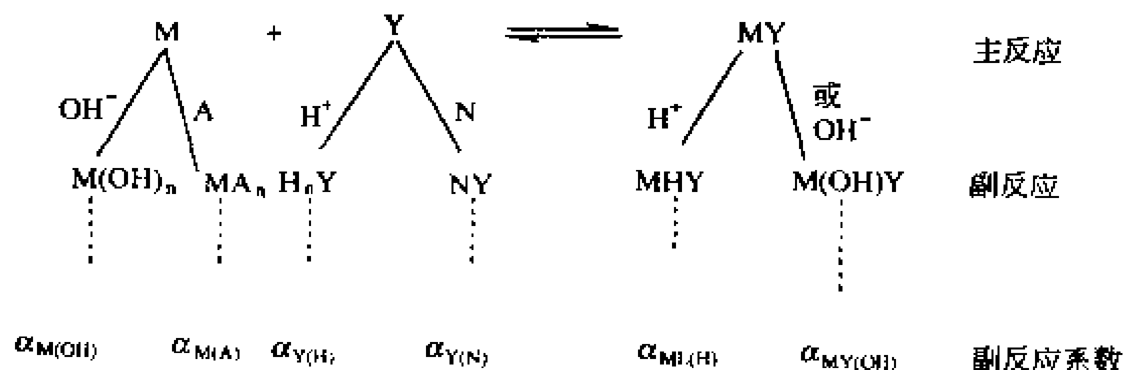
复杂耦合谱 complex coupling spectrum 分子内基团的耦合谱中，当两共振核 A、B 间的化学位移之差（以 Hz 计）与它们之间的耦合常数 J_{AB} 之比 $\frac{|\delta_A - \delta_B|}{|J_{AB}|} < 6$ 时，谱峰所呈现的耦合裂分峰的数目不满足 $2nI + 1$ 规则，且裂距也不相等，峰的强度也不符合二项式展开系数比，不再符合一级耦合谱或简单耦合谱的规律，这种谱称为复杂耦合谱。当使用高场仪器时，因 J 值不变而两个谱线的化学位移差 $\Delta\delta$ 变大，故一些复杂谱将简化呈一级谱，给图谱分析带来很大的方便。

复制 replication 以亲代 DNA 分子的两条链为模板合成各自互补链，形成两个子代 DNA 分子的过程。这个过程是半保留模式（即子代 DNA 双链中保留了一条亲代 DNA 的一条链）。DNA 复制的类型大致有 3 种：环状 DNA 的复制按 θ 形复制；单链 DNA 的复制按滚环模式复制；双链 DNA 的复制模式则为眼形复制。DNA 复制由一系列酶和蛋白因子参与，需要能量。DNA 复制过程中担任 DNA 合成的酶是 DNA 聚合酶，它能利用 3′→5′ 方向的模板链合成子链，合成方向为 5′→3′。由于亲代 DNA 双链中只有一条链的方向为 3′→5′，故另一条链（5′→3′）的复制只能先合成小片段 DNA（称为冈崎片段），然后连接成长的链，合成冈崎片段之前需由引婴合成酶先合成一小段 RNA 引物。由于亲代 DNA 的两条链的复制形式不同，故将其称为不连续、不对称的半保留复制。DNA 复制涉及解链、解旋、引物合成和修复、校正等过程，每个过程中都有响应的酶系统参与。DNA 复制的全过程大致包括以下内容：DNA 结合蛋白与 DNA 结合，使螺旋稳定性下降，出现瞬间局部链区域松弛，再由解旋

酶在此松弛区域将 DNA 解开，并由旋转酶解除 DNA 的超螺旋，由引物 3'-OH 端合成冈崎片段，由 RnaseH 切除 RNA 引物，DNA 聚合酶填补修复缺口，最后由连接酶将其连接成长链。3'→5'方向的模板链可以在一个引物上连续进行 5'→3'方向的链的合成。DNA 复制按阶段划分有起始、延伸和终止 3 个阶段，其中以起始阶段的机理和调节作用最复杂。

复制光栅 replica grating 用机械方法直接刻制的光栅称为原刻光栅，由原刻光栅复制的光栅称为复制光栅。复制光栅制造的基本原理是在刻制的光栅上先加上一薄层油脂物质，然后喷镀薄铝层，并用适当的方法将薄铝层揭下，同时粘在平板玻璃上。复制光栅的性能较原刻光栅为差，但用于制造光谱分析用的看谱或摄谱仪器已有足够的分辨率，而且制造成本可大大降低。商品光栅光谱仪器中都是装备复制光栅。

副反应系数 side reaction coefficient 配位滴定中，金属离子 M 与配体的反应（称为主反应）要受到溶液中共存的其他配位剂 A（如掩蔽剂）、金属离子 N 和溶液 pH 等的影响，与这些影响有关的反应统称为副反应，其影响程度的大小常用副反应系数 α 表示。α 可以通过计算或实验测定得到。例如 EDTA 与金属离子 M 的反应副反应系数 α 的注脚表示副反应发生的原因和影响对象。



副计量基准 secondary standard of measurement 通过与国家基准比对或校准来确定其量值，并经国家鉴定、批准的计量器具。副基准在国家计量鉴定系统中的位置仅在国家基准之下。

傅里叶变换电子自旋共振 Fourier transformation electron spin resonance; FT-ESR 也叫做脉冲傅里叶变换电子自旋共振（PFT-ESR），近年来得到迅速发展。相对于传统的连续波电子自旋共振（CW-ESR），PFT-ESR 是在一定磁场下，当照射宽度为纳秒级的微波频率脉冲或脉冲序列后，将得到的时域谱通过傅里叶变换转换成频域谱。因微波频率脉冲宽度的限制，及 ESR 谱的覆盖宽度有时达到几十甚至几百毫特斯拉，现在 PFT-ESR 只能测一些自由基的全谱，还无法测定过渡金属离子等 ESR 信号覆

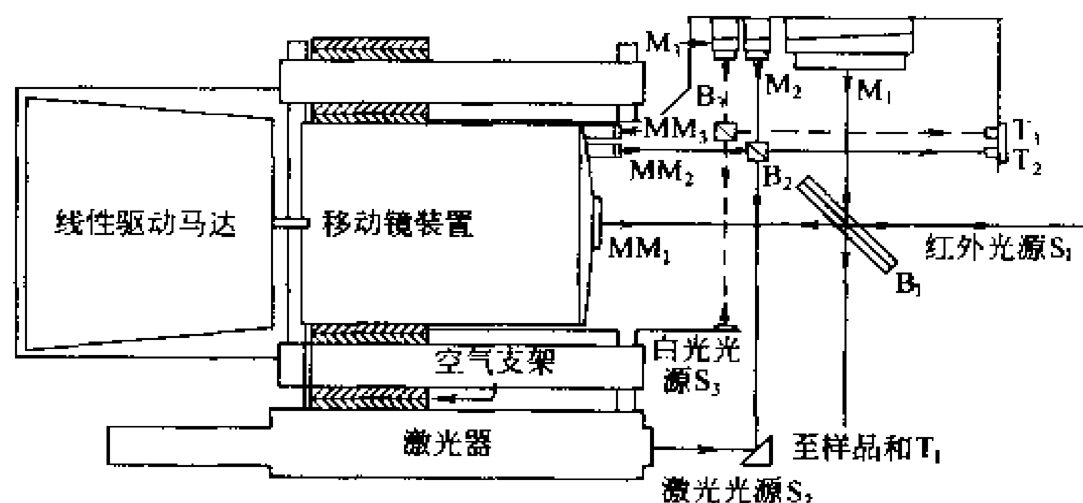
盖磁场宽度大的样品的全谱。即使如此，PFT-ESR 可以完成很多 CW-ESR 所不可能实现的测试（如二维谱、多维谱等），得到很多重要的信息。

傅里叶变换低温红外光谱 low-temperature Fourier transform infrared spectroscopy 低温傅里叶变换红外光谱是在所设定的低温下而获得的光谱。获得低温谱的设备主要是变温附件，它由可变温度池和温度控制器两部分组成。可检测的低温范围为 10～300K。低温红外光谱技术在半导体材料的结构成分分析、有机物质组分的定量、定性分析等领域都得以广泛应用，它比常温测量有很多优点。可使吸收峰大为窄化，可极大提高检测灵敏度，大大降低检测下限，甚至准确测出某组分低浓度杂原子等的浓度值，从而提高分辨率。变温附件主要是用来研究物质在低温下的热效应和变温特性，可研究半导体材料的结构，杂原子的组态及其晶格位置所在。在结晶高聚物的熔点附近测量，可以辨别结晶体和非晶带。在生物化学上，可以研究 LB 膜的温度效应，蛋白质的冷热变性等。

傅里叶变换高压红外光谱法 high pressure Fourier transform infrared spectroscopy; HP/FTIR 红外光谱是研究化合物、材料结构变化的最有力的工具之一。如把压力附件放入红外光谱仪进行原位测定就可以获得压力引起的化学变化和物理变化的信息。通常物质在高压下会出现一些新的化学合成反应，产生常压下不能获得的新产物。如高压引起分子堆砌密度增大而产生常压下没有的其他晶态，并随压力变化而发生相转变。许多如宇宙飞船、潜水艇的结构材料都需承受高压、低温的环境。大自然中许多物质如煤、石油及一些矿都是来自高压、高温反应。因此，研究高压、高温下的化学反应、催化反应机理、材料结构和性能的变化，对于了解材料使用的临界条件、材料老化的原因及筛选适合于绝对条件下使用的新材料，以及在人造压力条件下研究生命的起因、地球的演变及地壳的组成都有重要意义。

傅里叶变换红外分光光度计 Fourier transform infrared spectrometer 它由红外光源、具有特种干涉仪的光学系统、检测器以及数据处理与控制系统组成，是获得物质红外光谱或物质与红外光谱相互作用信息的仪器。红外光源是能提供一定波长范围的红外光光束。通常有四种：（1）能斯特光源；（2）硅碳棒；（3）涂陶瓷的金属镍铬丝螺管；（4）高压石英灯。光学系统是仪器的核心部件。它包括了主干涉仪和辅助干涉仪，前者常用迈克尔逊干涉仪，它由固定镜分束器和在空气轴承上平稳移动的动镜组成，也有用积层光栅或其他形式的。用它可以获得时域红外信号，而后者又由激光干涉仪和白光干涉仪构成。激光干涉仪是用来控制对样品干涉图进行等间隔的采样的，而白光干涉仪用来显示零光程差位置并同时能触发

每次采样以确保信号累加时有相同的起点。先进的干涉仪采用双束激光偏振伺服控制电路，使计算机在任何时刻都能准确知道动镜的位置。检测器可用高莱管，TGS热释电检测器，半导体Ge或Si测辐射热计和HgCdTe光子探测器。它用来接收红外干涉图信号，随后进入计算机数据处理系统，信号经模数转换器后，以数字化的形式存贮在计算机内存中，由计算机进行数字傅里叶变换，转为频域信号，再经数模转换器，成为红外光谱，由绘图仪器记录谱图。这些都是由计算机自动控制完成的。傅里叶变换红外分光光度计的光学系统如下图所示。与色散型光谱仪相比，傅里叶变换红外分光光度计具有信噪比高，光通量大，灵敏度高、分辨本领大，适合做高分辨光谱，测量精度高，再现性好，杂散光干扰小，分析速度快等诸多优点，因此正在迅速取代色散型光谱仪。



傅里叶变换红外分光光度计

傅里叶变换红外光声光谱 Fourier transform infrared photoacoustic spectroscopy; PAS/FTIR 利用光声效应检测固体、液体和气体物质的一种光谱技术。当物质在光的照射下产生选择性的吸收时，所吸收的能量转化为光声池中气体分子的振动能，产生压力波动为微音器所检测，就可得到光声信号PAS，扫描照射光的波长就可以得到光声光谱。PAS信号含有光-热-声过程，所以信号的大小不仅取决于光吸收的大小，而且也取决于样品的热学性质。红外光声光谱法所测定和研究的对象包括：（1）强吸收、高分散的样品，如深色催化剂等。（2）制样困难的样品，如橡胶和一些高聚物。（3）需要进行无损分析的样品，如只需测定其表面的生物样品或古文物等。

傅里叶变换拉曼光谱仪 Fourier transform Raman spectrometer; FT-Raman 与传统的色散型拉曼光谱仪相比较，它有以下特点：（1）它以近红外激光（$\lambda = 1064$nm）为激发光

源，大大降低了测定中产生荧光的可能性，拓宽了拉曼光谱的应用范围；(2) 它是通过 Michelson 干涉仪得到干涉图并达到分光的目的，光谱仪的辐射通量大，从而提高了仪器的灵敏度；(3) FT-Raman 光谱仪测量精度高。FT-Raman 光谱仪的缺点是：水对 FT-Raman 光谱测定有影响，因激光光源为近红外激光，因此所产生的拉曼强度相对弱一些，根据拉曼散射的散射截面与波长 4 次方成反比的关系，因此，1064nm 与 514.5nm 光源相比，散射截面较 514.5nm 的小 16 倍。对深色或黑色样品，由于热背景而难于测定。

傅里叶变换离子回旋共振质谱仪 Fourier-transform ion cyclotron resonance mass spectrometer; FT-ICR MS 一种高性能的高分辨质谱仪。它的核心部件是带傅里叶变换程序的计算机和捕获离子的分析室。分析室是一个置于强磁场中的立方体结构。离子被引入分析室后，在强磁场作用下以很小的轨道半径作圆周运动，此时不产生可检出信号。如果在立方体的一对面上（发射极）加一快速扫频电压，当满足共振条件时，离子吸收射频能量，运动轨道半径增大，产生可检出信号。这种信号是一种正弦波，振幅与共振离子数目成正比。实际使用中测得的信号是在同一时间内所对应的正弦波信号的叠加。这种信号输入计算机进行快速傅里叶变换，利用频率和质量的已知关系可得到质谱图。傅里叶变换质谱仪具有很高的分辨率（可达 100 万以上）和很高的灵敏度，但仪器价格和维持费用也很高。

富集 enrichment 利用物理、物理化学性质和化学原理，采用各种分离手段使待测痕量元素的含量（浓度）比之在原始基体里的含量（浓度）增加的过程。溶剂萃取、离子交换、沉淀分离法等都是常用的富集手段。

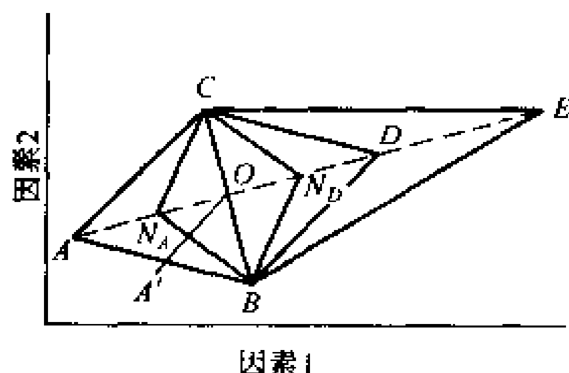
富勒烯 fullerene 1985 年由 H. W. Kroto 等发现。将石墨用激光气化得到的物质用质谱法分析后发现，C_{60}比其他碳原子数的峰高很多，C_{70}次之，而且 C_{60} 比其他裂片稳定，满足 sp^2 杂化，为呈足球状的 32 面体（其中 12 面为正五角形，20 面为正六角形）。随后发现，碳电极放电时碳气化得到的煤烟中含有大量 C_{60}。除了 C_{60}、C_{70} 以外，还发现了各种球状的碳聚集体 C_n。后来用建筑拱形球场有名的设计师 R. B. Fuller 的名字命名这类分子为富勒烯（fullerene）。这类分子具有优美的分子结构，后来又发现了其超导性以及抗艾滋病活性等，因此其研究与应用备受关注。

富燃火焰 fuel-rich flame 火焰中燃气的量比按化学计量所需要的量有富余的火焰。这种火焰中富含有 CH、CO、CN、C 等还原性物质，O、OH 的分压降低，火焰具有强烈的还原性，有利于易形成单氧化物、难解离氧化物的元素的原子化。富余燃气过多，会造成背景加深，亦不利于分析测定。

G

伽瓦尼（可逆）电池 Galvanic cell 两个电极和合适的电解质组成的一个原电池。在工作时通过自发的电化学反应向外电路输出电能，它可以作为电源用，也可以作为电分析化学电池用。

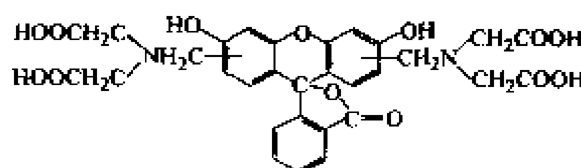
改进单纯形法 modified simplex method 利用多维空间中的某种凸图形移动以实现实验参数优化的一种动态调优方法。1965 年由 J. A. Nelder 等提出。是在基本单纯形优化法的基础上，引入了反射、扩展与收缩等操作规则，变固定步长推移单纯形为可变步长推移单纯形，在保证优化精度的条件下，加快了优化速度。是各种单纯形优化法在分析测试中应用最广的一种。如图。参见**基本单纯形**条。



改良型 Neubauer 计数盘 improved Neubauer counting chamber 是一种改良型血细胞计数仪，用于计数血细胞的专用工具，用优质玻璃制成。每个计数盘有两个相同的计数室，计数室分为 9 个大方格，每个大方格面积为 $1mm^2$。四角大方格作为计数白细胞用。中央大方格又用双线分为 25 个中方格，每个中方格分为 16 个小方格（每个小方格面积为 $1/400mm^2$），通常作为计数红细胞和血小板用。

改性载体 modified support 以惰性物质微粒为基质，在其表面进行修饰、改造后得到的适合于不同分离目的的色谱固定相载体。这种载体有的可以直接用作固定相填料，但多数情况下是用作进一步制备色谱固定相的基体（基质或载体）。

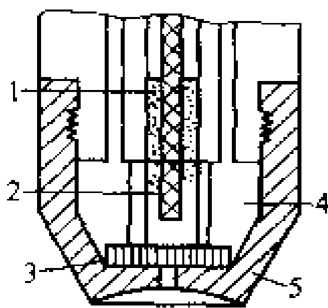
钙黄绿素 calcein 别名双-[*N*,*N*-二(羧甲基)氨甲基]荧光素，2,6-二羟基-双[*N*,*N*-二(羧甲基)氨甲基]荧烷，荧光氨羧络合剂，荧光素氨羧络合剂等。市售品为游离酸或二钠盐，



通过荧光素与甲醛和亚氨二乙酸经 Mannich 缩合制得。游离酸为橙色粉末，于 300℃熔融并分解；二钠盐为红褐色粉末，于 185℃熔融并分解。固体样品置于暗处相当稳定，但其钠盐的水溶液在室温下不稳定。游离酸微溶于水，溶于碱的水溶液呈橙红色。室温下于 30% 甲醇水溶液中用电位滴定法测得的酸离解常数为 $pK_{a1}=2.1$，$pK_{a2}=2.9$，$pK_{a3}=4.2$，$pK_{a4}=5.5$，$pK_{a5}=10.8$，$pK_{a6}=11.7$。主要用作钙的荧光试剂以及螯

合滴定中的金属荧光指示剂等。

钙离子选择电极 calcium ion-selective electrode 一种选择性测定钙离子（Ca^{2+}）的电极。它是一种典型的液态膜离子选择电极，即传感膜由不溶于水的含被测离子的有机溶液所形成。钙离子选择性电极的构造如下图所示。电极内分别装有两种溶液，一种是内参比溶液并与内参比电极相接；另一种是不溶于水的 0.1mol·L^{-1}二癸基磷酸钙的苯基磷酸二辛酯溶液，后者被吸附在憎水性的多孔膜材料中形成一层传感膜，由于此膜溶液中 Ca^{2+} 的活（浓）度与外部待测水溶液中 Ca^{2+} 的活（浓）度不同，从而可基于产生的相界电位按电位法测定外部待测水溶液中 Ca^{2+} 的活（浓）度。



液态膜离子选择性电极

1—内参比溶液；2—银-氯化银内参比电极；3—多孔薄膜；4—离子交换剂贮液；5—液体离子交换层

盖勃氏法 Gerber method 一种测定乳与乳制品中脂肪的方法。在盖勃氏乳脂计中加入硫酸，与样品混合分离乳中脂肪后，置于乳脂离心机上离心分层，在特定条件下测定脂肪层读数，得出相应的脂肪百分含量。

盖革计数器 Geiger counter 一种检测 X 射线强度的充气检测器，其工作电压控制在气体放大因子与外加电压曲线上的盖革计数器区内，又叫盖革-弥勒计数器或 G-M 计数器。盖革计数器一般以金属制成圆筒型外壳并开有 X 射线窗口，圆筒的中央是一根极细的金属丝作为阳极，金属外壳作为阴极。入射的 X 射线光子与筒内的气体分子碰撞，引起初级电离，由于外加电场极强，可立即引起雪崩式的全体积放电，从而在阳极的串联电阻上形成一个电压脉冲。为了开始下一次放电，必须设法使前一次的放电“淬灭”。“淬灭”手段有依靠外电路的“非自淬灭”和在计数器内加淬灭气体的“自淬灭”两种方式。由于淬灭气体的分解和消耗，自淬灭式盖革计数器有一定的使用寿命。盖革计数器的特点是构造简单，输出脉冲幅度大，对一定能量范围的 X 射线有较高的探测灵敏度，缺点是死时间较长，且由于输出脉冲的大小只取决于工作电压，而与入射 X 射线的能量无关，因而没有能量甄别作用。

概率 probability 随机事件出现可能性的量度。在分析测试中，测量值是一个以概率取值的随机变量，它以概率形式表现的统计规律性，在通常的情况下遵从正态分布。概率与概率密度是有区别的，概率是一个无名数，没有量纲，其值在［0，1］之间；概率密度的量纲是变量 x 的倒数，可取任何的正数。

干电池 dry cell 由于电池电极的活性物质不可通过充电再生利用，只能一次性使用的化学电源。例如锌锰电池是目前使用量最大的干电池。

干法灰化 dry ashing 一种分解破坏有机试样，除去动、植物，生物流体，污水等中有机物干扰，制备试样溶液以便实现试样中无机物测定的方法。如将试样于马弗炉中在400～700℃的高温下，利用大气中的氧将有机物燃烧掉，留下的无机残余物经适当试剂（如6mol·L^{-1}的盐酸或热的浓硝酸）溶解处理成溶液后进行其无机物的分析测定。干灰化法是一种常用的样品无机化处理方法。用干灰化法处理生物样品不但较为简便，适合大批量样品的处理，而且无需加入大量可能导致干扰测定的试剂，空白值较低。但是此法不宜用于挥发元素，如As、Hg、Cd、Se、Sn等的测定。依照灰化的方式不同，干灰化法有高温（炉）灰化法、低温灰化法和氧瓶燃烧法。

干法形态分析 dry species analysis 采用干法分析手段对污染物的形态进行分析的方法。参见**干式分析监测**条。

干法柱填充 dry column packing 将干燥的色谱填料直接装柱的方法。通常是在硬台面上铺上软垫或棉布块，将空柱管上端打开垂直放在软垫上，用漏斗每次灌入50～100mg色谱填料，然后垂直于台面上下墩10～20次，柱下端离开台面的距离约5～10cm。

干凝胶 xerogel 硅酸在常温下脱水得到的水凝胶在高温（140℃以上）下进一步缩合得到的产物。液相色谱中用作固定相的硅胶是干凝胶，不过，其制备主要采用有机硅水解新工艺。

干扰素 interferon 一组诱导细胞抗病毒感染的蛋白质。动物被病毒感染后合成干扰素并在血清中保持较长时间。干扰素不直接杀死病毒，而是通过对作用于病毒基因转录和翻译的宿主细胞酶的诱导而产生抵抗力。根据对热和pH的稳定性及诱导方法对干扰素进行分类：Ⅰ型干扰素是用病毒或多聚核苷酸诱导产生的，对热（56℃）和极端pH（pH=2或pH=11）稳定。Ⅱ型干扰素是由免疫反应和植物凝集素诱导的，对热和极端pH不稳定。根据细胞来源，Ⅰ型干扰素进一步被分成白细胞分泌的α和成纤维细胞分泌的β两型。Ⅲ型干扰素也称为γ干扰素或免疫性干扰素，是由促丝裂素刺激的T淋巴细胞和自然杀伤细胞分泌的。

α干扰素主要为白细胞分泌的干扰素。它的分泌受RNA型或DNA型病毒、单链或双链多聚核苷酸诱导。β干扰素主要由成纤维细胞分泌，受RNA型或DNA型病毒、单链或双链多聚核苷酸诱导。α、β干扰素能抑制病毒复制。γ干扰素主要由表及里活化的T细胞分泌，对多种细胞有广泛的效应。根据对极端温度与pH值的不稳定性，可区别γ干扰素与α干扰素和β干扰素。γ干扰素的主要作

用是：（1）抑制病毒在许多细胞中的复制；（2）诱导Ⅱ类组织相容性分子在内皮细胞、上皮细胞和结缔组织细胞的表达，使这些细胞变成抗原呈递活性细胞；（3）活化巨噬细胞以提高其杀伤微生物和杀伤肿瘤的活性，并增加 Fcγ 受体的表达；（4）抑制细胞的生长；（5）诱导很多髓样细胞株的分化。人类干扰素基因序列已拼接成功，现已可采用基因工程方法来生产干扰素。

干扰效应 interference effect 原子吸收光谱分析中，干扰效应按其性质和产生的原因，可以分为四类：物理干扰、化学干扰、电离干扰和光谱干扰。在发射光谱中最重要的光谱干扰是背景干扰。带状光谱、连续光谱以及光学系统的杂散光等，都会造成光谱的背景。其中光源中未离解的分子所产生的带状光谱是传统光源背景的主要来源，光源温度越低，未离解的分子就越多，因而背景就越强。在电弧光源中，最严重的背景干扰是空气中的 N_2 与碳电极挥发出来的 C 所产生的稳定化合物 CN 分子的三条带状光谱，其波长范围分别是 353 ~ 359nm，377 ~ 388nm 和 405 ~ 422nm，干扰许多元素的灵敏线。此外，仪器光学系统的杂散光到达检测器，也产生背景干扰。由于背景干扰的存在使校正曲线发生弯曲或平移，因而影响光谱分析的准确度，故必须进行背景校正。

干扰抑制电导率检测 detection of interfere and restrain conductivity 在电泳区带进入电导池之前将强电导的缓冲溶液离子转换成弱电导形式，消除或减少背景电导率，提高测定样品区带微小电导率变化的灵敏度。这种转换通过特殊设计的抑制器来实现，抑制器由具有离子交换功能的材料构成。若分离体系为阴离子，采用装有阳离子交换剂的抑制器；若分离体系为阳离子，抑制器采用阴离子交换材料。

干扰元素 interference elements 指在所选分析测定反应中能产生与被检物质类似效应（如颜色变化，沉淀，电学、光学性质等）从而影响测定结果的，与被检物质共存于试样中的元素或其化合物。

干涉滤光片 interference filter 利用光的干涉原理，以获得狭窄光谱带的器件，通常由两块玻璃片之间附着两层或多层金属膜构成。干涉滤光片的优点是透射光的波长范围窄，透光率高，透射光的波长决定于金属膜之间的距离。多层干涉滤光片由 5 ~ 25 层膜组成，有效带宽可达 8nm，透光率为 60% ~ 95%。目前，已可制成从紫外到红外光谱区的各种谱带的干涉滤光片。

干涉条纹消除法 elimination of interference veins 在薄膜样品的红外光谱图中常看到的有规则的波形峰是薄膜产生的干涉条纹。干涉条纹与样品的吸收峰重叠会给定性定量分析带来干扰，消除的方法是使薄膜表面微微不平滑或厚度不同，在聚四氟乙烯膜表面热压样品，所得膜的表面没有

在抛光了的金属表面上所得的膜光滑,这样就可防止干涉条纹的出现。另外,将溶液在毛玻璃上成膜也可以消除干涉条纹。

干涉调制光谱仪 interference modulated spectrometer 经典光谱仪不能同时兼顾光强与分辨率,圆孔光谱仪的光强较强,但分辨率较低;狭缝光谱仪的分辨率较高,但光强较弱。采用新的色散方法-光波调制技术,可以同时兼顾光谱仪的光强与分辨率。光学光谱区的电磁波调制技术,目前主要采用干涉调制法;按照干涉调制原理制造的光谱仪,称为干涉调制光谱仪。干涉调制光波的方法有两种,即选择性调幅法和调频傅里叶变换法,选择性调幅法主要用于制造分光计,调频傅里叶变换法可以用于制造光谱仪。

干涉图 interferogram 理想状态下,单色光的干涉图是关于产生光干涉原因因素(如光程差δ)的一条余弦曲线,复色光的干涉图是其所包含的多种单色光产生的余弦曲线的叠加。在非理想状态下,检测器测得的干涉强度除同光源强度$I(\nu)$有关外,也与分束器透射、反射效率、探测器对光谱频率的响应、放大器特性等有关。

干涉图的相位误差 phase error on interferogram 在FTIR技术中,理想状态下干涉图$I(x)$和光谱$B(\nu)$之间存在着余弦傅里叶变换对的关系。即从干涉图$I(x)$计算所获实际光谱$B(\nu)$必须知道零光程差的精确位置,况且在多次扫描叠加采集干涉图数据时,也必须以零光程差的位置为基点,否则计算出的光谱将是失真的畸变光谱,无法使光谱如实还原。虽然理想状态下干涉图应是左右对称的偶函数。但实际测得的干涉图常因如下的原因而成为非对称干涉图:(1)光学系统中干涉仪两臂不严格垂直;(2)分束器均匀性不好;(3)入射光发散产生非线性色散,光程差将不是频率的函数;(4)计算机数字化采样间隔不等距;(5)仪器光学系统和电子线路系统的不完善性,难以保证在多次扫描收集数据中,零光程差$x=0$点处能次次重合。因此真实光谱$B(\nu)$总要进行相位校正。

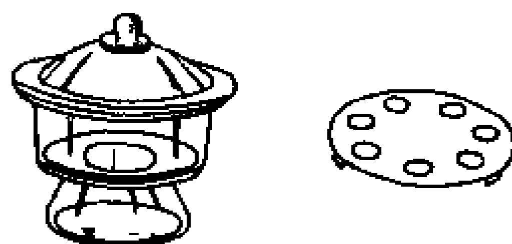
干涉仪 interferometer 将来自光源的一束光分成为两个或许多个分光束,使之以可控制的光程差相互干涉,获得干涉图的仪器装置。在干涉仪中主要使用有迈克尔逊干涉仪和可调谐干涉仪。在激光光谱技术中,各种干涉仪不仅用于测量荧光线宽,也用于使激光的发射光谱变窄,以及用于控制激光带宽和激光波长的稳定性。棱镜光谱仪和光栅光谱仪获得的光谱,也可以认为是一种干涉光谱。前者是零级干涉光谱,后者是非零级干涉光谱。但是,光栅光谱仪一般只采用1~2级光谱,因而难于达到几十万以上的分辨率,干涉光谱仪经常采用较高谱级的光谱,因此可获得几十万到几百万的分辨率。这种高谱级干涉光谱仪,通常称为高分辨率光谱仪。这种光谱仪的色散率很大,自由色散区较窄。为此,要采用预色散器(或窄带滤光片),选取一定的波段。

预色散器的色散率，必须大于干涉元件的自由色散区。发射光谱分析常用的高分辨率光谱仪，有中阶梯光栅光谱仪和法布里-珀罗光谱仪等。

干式分析监测 dry analysis 试样不需要制成溶液的分析监测技术。在环境监测中，为对大气污染进行实时自动监测，发展了干法监测仪器，如监测一氧化碳的红外相关法等；在实验室分析中，许多仪器的制样技术不需采用溶液，如X射线荧光光谱分析、中子活化分析、电子显微镜法等均属干法分析范畴。就自动监测而言，如脉冲荧光法二氧化硫测定仪、化学发光法的氮氧化物测定仪等都属干法分析。干法分析监测具有操作简便、实时、准确，不需更换溶液等优点；缺点是仪器价格比较昂贵。但若以一个数据的投资而论，干法分析的成本并不比湿法高。

干燥阶段 dry stage 石墨炉原子化升温程序中低温除去溶剂的阶段。干燥的目的是除去溶剂，以避免溶剂对随后灰化和原子化过程的影响。干燥时需优选干燥温度和干燥时间，干燥温度要稍低于溶剂的沸点，干燥速度不能过快，以避免造成溶剂暴沸和被测元素的损失。当分析试样中被测元素含量很低时，有时采用多次进样和干燥的方法增大被测元素的总量，以提高测定的相对灵敏度。

干燥器 desiccator 为保持试样干燥或在分析工作中进行试样冷却时所用的一种密封玻璃容器，最常见的一种干燥器如右图所示。有时它亦被用于干燥湿的试样。干燥器的盖与本体之间靠磨口玻璃边缘（上涂凡士林或其他润滑脂）密封，下部放干燥剂，中间放置一块瓷板用来放置盛有被干燥或冷却试样的容器。干燥剂失效时（变湿、受潮结块或变色，如变色硅胶由蓝色变红色时）要及时更换。下表是常用的一些干燥剂的性质。其中的 Al_2O_3、$MgClO_4$、CaO、$CaCl_2$ 和硅胶可分别在 150℃、240℃、500℃、275℃和150℃加热得以再生。还有一种可抽真空的干燥器，即在普通干燥器盖的中央有能联结真空装置的密封三通阀，除具上述功能外，主要用于真空保存试样。



常用的一些干燥剂的性质

干燥剂	干燥能力	是否易潮解
$CaCl_2$（无水）	高	是
$CaSO_4$（无水）	中	否
CaO	中	否
$MgClO_4$（无水）	高	是
硅胶	低	否
Al_2O_3	低	否
P_2O_5	低	是

干燥时间 dry time 在石墨炉升温的干燥阶段，蒸发溶剂干燥试样所需的时间。干燥时间的长短取决于溶剂的性质和量，蒸发易挥发的有机溶剂，比水溶液样品所需干燥时间较短，若进样量大，则需要较长的干燥

时间。

干燥温度 dry temperature 在石墨炉升温的干燥阶段，除去试样溶剂所需使用的温度。干燥温度的高低取决于溶剂的性质。通常是在比溶剂沸点稍低的温度下干燥，以避免溶剂暴沸引起试样发生“飞溅”与干燥速度过快、溶剂快速蒸发造成被测元素的“夹带”损失。

干柱色谱法 dry-column chromatography 使用干燥填料柱进行分离制备的色谱方法。具体操作是先将干的吸附剂装入色谱柱中，然后将欲分离的样品溶液加到干柱的顶端，待样品溶液渗入柱后立即加入淋洗溶剂（流动相），淋洗液靠毛细作用沿柱自上而下，使样品组分逐渐分开，在接近柱底部时，停止洗脱，将吸附剂按柱上的色带切割开，分别用合适的溶剂洗出。干柱色谱法所需时间短（30～60min）、消耗溶剂少、处理样品量大（可达g级水平），可用于天然产物的分离。

肝素 heparin 肥大细胞合成和分泌的一种酸性黏多糖，分子量呈高度不均一性，自1000～57000不等。占正常人血浆含量的9mg·L^{-1}。肝素的抗凝作用需依赖抗凝血酶Ⅲ（AT-Ⅲ）、肝素辅因子Ⅱ（H-CⅡ）和激活的蛋白C抑制物（APCI）。肝素作为抗凝药和抗凝剂已有广泛应用。

坩埚膨胀序数 crucible swelling number 也称自由膨胀序数。是在一定条件下，以煤在坩埚中加热所得焦块膨胀程度的序号表征煤的膨胀性和塑性的指标。它是将一定质量的煤样放在专用的坩埚中，在专用炉内按规定的方法加热，煤在加热过程中被干馏而生成不同形状和大小的焦炭块，将所得焦炭块的最大侧型与一组带序号的标准侧型图比较，从而定出相应的序号-坩埚膨胀序数。此序数是从1～9，以1/2为一个间隔。煤的坩埚膨胀序数主要取决于煤在加热过程中的熔融情况，所以它在胶质期间的析气情况和胶质体的透气性一定程度上能反应煤的黏结性。在国际煤面料分类中，用它作为一个分类指标，在炼焦工业中，用它来评价煤的结焦特性，在燃烧工业中，用它来指示煤在某些类型燃烧设备中的结焦倾向。

感光板 photographic plate 感光板是根据光化学反应原理制成的。发射光谱分析用的感光片，由感光层、防晕层和玻璃片组成。感光层是将含有卤化银颗粒（如溴化银）的乳剂均匀涂于玻璃片上而制成的，有的还含有极少量的特种染料。卤化银颗粒是感光单元，对光十分敏感，起着记录影像的作用。卤化银颗粒的大小，对感光度和分辨率有很大的影响。明胶起悬浮卤化银颗粒的作用，具有灵敏度高、清晰度好和便于加工等优点。玻璃片是承托乳剂之用的，它必须平整光滑、薄厚均匀、透明度好，并具有一定的弹性强度。防晕层用以防止影像周围产生晕影，由染料和明胶组成，涂在玻璃片与乳剂之间。这种晕影主要由乳剂的散射和玻璃的折射引起，染料的作用就是把透过乳剂

的光吸收。在 350nm 以下的紫外光谱区工作时，由于玻璃本身对紫外光吸收，因而不需要专门的防晕层。

感光板反衬度 contrast of photographic plate 感光板的一个重要的性能是乳剂的反衬度。乳剂的反衬度反映了黑度随曝光量变化的快慢。在一定的实验条件下，不同的感光片具有不同的反衬度。按照反衬度的不同，感光片可分为普通、硬、特硬和超硬等型号。普通感光片具有一定的反衬度，特性曲线具有较大的线性范围，因而有较宽的分析范围。硬型感光板具有较高的反衬度，特性曲线具有较大的斜率，因而有较高的分析精密度。

感光板分辨能力 resolving power of photographic plate 也称为解像能力，用感光片上每毫米能分辨并等距等宽的平行线像的条数来表示。是评价感光板性能的一个重要指标。乳剂的分辨率主要取决于卤化银晶体颗粒的大小。快型感光片的卤化银晶体的颗粒较大，灵敏度较高，而分辨率较低。显微感光片的卤化银晶体的颗粒较小，分辨率较高，而灵敏度较低。选用发射光谱分析用感光片，其分辨率需与摄谱仪的分辨率相适应。

感光板灵敏度 speed of photographic plate 又称感光度，是感光板的重要性质之一。灵敏度是指乳剂感光能力的大小，一般分为光谱灵敏度和普通灵敏度两种。光谱灵敏度是对某一波长的单色光的感光能力。不同类型的感光片具有不同的光谱灵敏度。一般乳剂的感光范围大约为 250～500nm，大于 500nm 的红、绿光不被卤化银吸收，而小于 250nm 的紫外光则被明胶吸收。为了扩大乳剂的感光范围，通常加入光学增感剂，增感剂吸收相应波段的光量子，并把能量传给卤化银使之感光。普通灵敏度是指对白光的感光能力，常称为感光度。感光度的大小与达到一定黑度的曝光量成正比。

感光元 photographic cell 指感光板上的卤化银颗粒。感光板是根据光化学反应原理制成的。发射光谱分析用的感光片，由感光层、防晕层和玻璃片组成。感光层是将含有卤化银颗粒（如溴化银）的乳剂均匀涂于玻璃片上而制成的。卤化银颗粒是感光单元，对光十分敏感，起着记录影像的作用。卤化银颗粒的大小，对感光度和分辨率有很大的影响。

50% 感染量 50% infection dosis; ID_{50} 与 50% 致死量（50% dethdosis，LD_{50}）相似，即病毒感染鸡胚物或组织培养细胞后，引起 50% 发生死亡或病变的最小量。测定原则即将病毒悬液连续稀释后，不同稀释度接种鸡胚、动物或组织培养细胞，经一定时间观察发病死亡数或病变数，以统计学方法算出 50% 感染量或致死量。

感应遥测 remote sensing by induction 即遥感。遥感技术是指从遥远的地方，对所要研究的对象进行探测的技术。即从一定距离外对地壳或地下一定深度的目标进行探测。这种技术不需要与目标物接触即可获得来自

目标的某些信息，如目标物的电磁波辐射特征，包括地物的发射、吸收、折射、透射等特征，也包括重力、磁力特征等。根据不同高度遥感平台（装置传感器的运载工具）上装置的传感器所测得的环境信息数据（以图像或数字表现），通过一定的数据处理、分析，便可以解释和识别物体。

钢的火花鉴别 spark testing of steels 利用试样在砂轮上磨削时发射出的火花特征来鉴别钢种的方法。这种方法简便快速，多用于钢材混号、废钢分类以及在无其他分析手段时对钢材的成分进行大致定性或半定量分析。此方法适用于碳钢、合金钢及铸铁，能鉴别出钢中常见的合金元素，但对 S、P、Cu、Al、Ti 等元素则无法由火花特征鉴别。由于火花鉴别是用肉眼观察，因此容易受操作经验的影响。

高度重复序列 highly repetitive sequence 在真核生物基因组中重复出现可达 10^6 次以上的 DNA 序列。这类序列复制速度很快，在人基因组中约占 20%。按结构特点可分为 3 种：反向（反转）重复序列（inverted repeat）、卫星 DNA（satellite DNA）、较复杂的重复单位组成的重复序列。其功能主要有：参与 DNA 复制的调节，参与基因表达的调节，参与基因转位作用、组成个体特异的 DNA 指纹、参与减数分裂时染色体配对过程等。

高分辨像 high resolution image 利用透射电镜的高分辨率、高放大倍数的特性，选用大孔径物镜光阑，让样品的透射束和周围的一个或多个衍射束通过，发生相互干涉而形成的相位衬度像。对于晶面间距 $d < 10$nm 的微晶结构，相位衬度成像提供晶格条纹像；或者得到与样品单胞结构相对应的晶体结构像，即称分子像或原子像。它用于研究物质中原子尺度的细节，可以直接观察物质中的原子排列。高分辨成像技术不仅用于测定透射电镜分辨率，而且已广泛用在生物、有机化合物、金属、超导材料和硅酸盐等领域，用于研究微晶结构、晶体缺陷、界面结构等。

高分辨质谱仪 high resolution mass spectrometer; HR-MS 分辨率在 10000 以上的质谱仪。利用该种仪器检测到的离子，质量精度可达毫质量单位。双聚焦质谱仪和傅里叶变换离子回旋共振质谱仪都属于高分辨质谱仪。用高分辨质谱仪所测得的精确质量数据可推导出离子的元素组成。

高分子多孔微球 porous polymer beads; GDX 由苯乙烯和二乙烯基苯共聚制得的高分子多孔微球，可作为气-固色谱或气-液色谱的固定相。被分离的组分直接在微球表面进行吸附或分配，它既可作为载体，又可起固定液的作用。这种多孔物质的疏水性很强，对水及乙二醇等极性物质有着十分理想的分离效能，是测定有机物中微量水的一种优良的色谱固定相。高分子多孔微球的粒径、孔径、极性都可以通过改变聚合工艺条件得

到不同分离功能的微球，以满足分析工作的需要。

高分子膜吸附法 macromolecular film adsorption 先在电极表面上修饰一层合成高分子或生物高分子，然后将生物功能物质吸附到高分子膜上，制备成感应膜，再与转换器结合，构成传感器的一种方法。

高分子载体包埋法 macromolecular carrier embedment 将生物功能物质与合成高分子 Nafion 或生物高分子丝素蛋白经溶剂混合而使酶包埋于其中，制备成具有酶活性的感应膜，再把它覆盖到转换器即电极的表面，以构成生物传感器的一种方法。

高聚物分子量 molecular weight of polymer 高聚物的统计平均分子量。合成的和天然的高聚物，除少数蛋白质外，都是分子量不同、结构也不完全相同的同系混合物，即具有多分散性，因此其分子量都是平均分子量。由于统计方法的不同，一种高聚物有多种不同的分子量：（1）数均分子量，分子量按照分子数分布函数的统计平均，可用渗透压法、沸点升高法、冰点下降法或端基分析法测得；（2）重均分子量，分子量按照分子质量分布函数的统计平均，可用光散射法测得；（3）Z 均分子量，分子量按照分子质量分数函数的统计平均。可用超离心法测得；（4）黏均分子量，通常指用黏度法测得的平均分子量。四者的关系一般是：Z 均分子量 > 重均分子量 > 黏均分子量 > 数均分子量。

高锰酸钾法 potassium permanganate method 一类以高锰酸钾为滴定剂，以其自身的紫红色指示滴定终点的氧化还原滴定法。高锰酸钾是一种很强的氧化剂，可用于直接滴定 Fe(Ⅱ)，As(Ⅲ)，Sb(Ⅲ)，$C_2O_4^{2-}$，NO_2^-，H_2O_2 等具有还原性的物质以及许多有机化合物，还可以间接测定能与 $C_2O_4^{2-}$ 定量沉淀为草酸盐的金属离子（如 Ca^{2+}，Th^{4+} 及稀土元素离子等）。由于 $KMnO_4$ 本身呈紫红色，滴定时无需外加指示剂。高锰酸钾法应用很广，主要缺点是 $KMnO_4$ 本身不纯，不能直接配制 $KMnO_4$ 的标准溶液，需按一定条件配制后用其他基准物（如 $H_2C_2O_4 \cdot 2H_2O$）进行标定。由于 $KMnO_4$ 的标准溶液不够稳定，使用一定时间后应重新标定。

高能电子衍射 high energy electron diffraction；HEED 选用能量为 5～100keV 的高能电子束入射到晶体所产生的衍射。利用这种衍射可以获得关于物体表面的结构信息。高能电子衍射的谱线有较高的亮度和锐度，杂散磁场的影响可以忽略；高能电子的平均自由程较大；当用电子束掠射到样品表面则可以保证它有足够的表面灵敏度。也是研究表面结构的一种有效方法。

高能离子散射谱 high energy ion scattering spectroscopy；HEISS 用较高能量的离子入射到固体表面，检测离子经表面碰撞后背散射出来的入射离子，测量它们碰撞后损失的动能所得到的谱图，也叫 Ernest Ruth erford

背散射。与低能离子散射谱相比，它主要用于比较厚的薄膜分析而不是表面分析，但由于它是一种无损、定量的分析方法，并可得到晶格结构的信息，因此在表面层的非破坏深度分析方面有相当重要的使用价值。其定量性比较好，并可以获得绝对量。但该方法对元素深度分布的层次不是很清晰，其深度分辨率也很差，不能给出直观的深度分布图，对界面现象也无法考察，因此在薄膜的界面分析上具有一定的局限性。

高能碰撞 high-energy collision 一般发生在扇形场结构的质谱仪中。在扇形场中，由于离子是在几千伏加速电压下运动，在进行碰撞活化时，碰撞能量很高，离子在碰撞后产生的碎片离子较多，因此提供的信息量也较大。

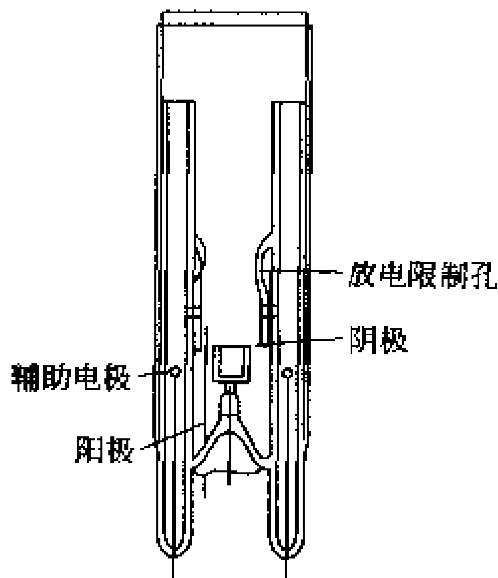
高频滴定法 high frequency titration 利用几兆周至几百兆周的高频电流通过滴定池，滴定过程中滴定池的电导与电容发生变化。它的电极不与溶液直接接触，不会发生电解和极化的现象。根据测量的方式不同可以分为总阻抗法，损耗法和频拍法。总阻抗法在滴定过程中，溶液的电导改变，使总阻抗值也随着变化，所以可以用通过滴定池的高频电流的大小对加入滴定剂的量作图，画出滴定曲线。损耗法是溶液电导的改变，引起电路里高频电能损耗的改变，通过高频电能损耗的测量对加入滴定剂的量作图，画出滴定曲线。频拍法是溶液电导的改变，引起滴定池的等效总电容的改变，使电路的振荡频率也跟着改变。可以用一个并联的可变电容器来抵偿此电容的改变，使电路回复到原来的振荡频率，以抵偿电容的改变对加入滴定剂量作图，画出滴定曲线。高频滴定法有突出的优点，其一是电极不与溶液直接接触，避免电极上发生电解，产生极化作用。电极的某些催化作用也不存在。沉淀覆盖电极也被消除，所以很多沉淀反应常常用高频法来指示终点。另一优点是能测定电容的变化。非水溶剂常常是低频电导变化不大，而溶液介电常数变化较大，电容值的改变比较大，宜用高频滴定。高频电导测量也被用来做动力学的研究及测定介电常数的变化。

高频电子自旋共振 high frequency electron spin resonance 常用的 ESR 谱仪使用 X 波段和 Q 波段微波频率。而对于其他波段 ESR 谱仪，根据所用微波频率的不同，常分为高频电子自旋共振和低频电子自旋共振。高频与低频并无严格的划分界线，但一般认为微波频率低于 X 波段的称为低频电子自旋共振，而高于 W 波段（含 W 波段）的称为高频电子自旋共振。高频电子自旋共振谱仪采用超导磁场。高频电子自旋共振可大大提高 ESR 的灵敏度和分辨率，可用于研究具有大的零场分裂的无机顺磁体系。

高频火花光源 high frequency spark source 普通火花光源的功率较大，不适宜于微区分析和表面分析。为了限制火花放电引起的试样损伤面

积和深度，可以采用小功率的微弱火花-高频火花。采用这种微弱火花，不仅试样受损较小，而且基体效应也较小，适宜于微区分析和表面分析，特别适宜于细丝、薄片、矿物颗粒和金属机件的分析。

高强度空心阴极灯 high intensity hollow cathode lamp 一种用于原子吸收光谱分析的锐线光源。普通空心阴极灯的原子溅射过程和光谱激发过程不是分别控制的，原子溅射效率高，而光谱激发效率并不高。高强度空心阴极灯是在普通空心阴极灯内增加一对辅助电极，用以增强光谱激发。在高强度空心阴极灯中，原子溅射和光谱激发过程是分别控制的。其结构如下图所示。



由阴极溅射出来的原子，由于扩散在阴极腔口形成自由原子云，辅助电极在腔口前产生低压电弧放电，产生的载气的离子、电子与自由原子相互碰撞，使自由原子激发发射光谱，从而提高了光谱激发效率，共振线的强度可以提高 30～50 倍。高强度空心阴极灯光源的优点是光谱发射强度大，可以获得高的信噪比。

高斯分布 Gauss distribution 又称正态分布。参见**正态分布条**。

高斯计 Gaussmeter 也叫磁强计。是用来测定磁场强度的计量仪器，最常用的是核磁共振磁强计和霍尔效应磁强计。核磁共振磁强计实际上就是一台简单的 NMR 波谱仪，它是利用核磁共振频率与被测磁场强度成正比这一基本原理，通过测定某一标准核磁样品的共振频率来测量磁场强度。霍尔效应磁强计的特点是尺寸小，常用于电子顺磁共振实验的磁场强度测量，使用时将霍尔探头固定在谐振腔内。

高斯线型 Gaussian line shape 见 **NMR 谱线型条**、**ESR 谱线型条**。

高速逆流色谱法 high speed counter-current chromatography; HSCCC 分离柱管不仅绕仪器中轴线公转，而且还绕自身轴线自转的一种高速高效的逆流色谱法。自转与公转同时进行使两溶剂相剧烈混扰、反复混合和分层，其分配转移的频率高达每秒十多次，对溶质的分配分离非常有利。

高速热场流分级 high velocity thermal field flow fraction 热场流分级的一种改进型方法。热场流分级速度慢（分离一次样品需几个小时）。为了提高分析速度，可选择黏度低的溶剂并提高工作温度，从而使体系扩散系数 D 减少，同时增加柱槽上下板的温度差 ΔT，减少溶质层的有效

厚度，可以大大提高分离速度和效率。这称为高速热场流分级法。例如：Giddings 等对比了 $\omega = 0.127mm$ 和 $\omega = 0.0051mm$ 的聚酯薄膜为夹层的柱槽，对不同分子量的聚苯乙烯标准分子量的样品进行分离，前者在 2.5h 分开 6 个样品。而后者仅需 5min 就分开 3 个样品。参见**热场流分级**条。

高通滤波器 high-pass filter 截止滤光片的一种。它可使波长长于该滤光片标示波长的光通过，而使波长短于该滤光片标示波长的光被滤掉。

高温硅烷化去活 high temperature silanizing deactivation 适用于石英毛细管柱的一种去活方法。将六甲基二硅烷胺（HMDS）试剂以动态法（液柱速度为 $4 \sim 5cm \cdot s^{-1}$）涂渍在毛细管内表面上，把柱两端封口后快速加热到 300℃ 或 400℃，在此温度下保持 20h，这样处理后的毛细管柱可获得很好的去活效果，也可采用二苯基四甲基硅胺烷作去活试剂，因它具有较大的分子体积可以掩盖未反应的硅酸基，其效果可能更优于采用 HMDS 去活试剂。

高温灰化法 high temperature ashing 根据待测组分的性质，将样品放入铂、石英、银、镍或瓷坩埚中，先将粉碎或匀浆样品低温干燥并灰化，再置于高温电炉中加热，炉温控制在 450～550℃ 灰化 2～4h，灰化完全的样品经溶解供分离富集和测定用。该方法适用于含不挥发性的金属或元素的样品的处理，是比较彻底的消化法，但耗电较多。样品在干灰化过程中，一般无需添加试剂。有时为了促进分解或抑制挥发损失，也可在试样中加入硝酸、硫酸、磷酸、硝酸镁、氧化镁和氯化钠等灰助剂。

高温凝胶色谱法 high temperature gel chromatography 在高温条件下进行分离和检测的凝胶色谱法。用于在常温下不溶解的高分子样品的分析，通常是将凝胶色谱仪的进样器、色谱柱和检测器部分加热到 150℃ 左右。

高温液-液萃取 liquid-liquid extraction in high temperature 使用特殊的高温体系进行萃取分离的方法。曾被研究用于核燃料后处理中裂变产物的分离。例如：熔融盐-液态金属萃取体系，在 500℃ 用 LiF-BeF-KF 或 $MgCl_2$-KCl-NaCl 熔融盐从含 6.2% 铀的铀-铋合金中萃取除去裂变产物，可避免金属铀的溶解、转化工艺。又如，在 150℃ 用 TBP 的多联苯溶液从 $LiNO_3$-KNO_3 熔融盐中萃取铒、钕、镧、镅、镎(Ⅴ)、镎(Ⅵ)、镎(Ⅳ)等。这些化合物的分配比比在水溶液中萃取高 100～1000 倍。

高效毛细管电泳 high-performance capillary electrophoresis 离子或荷电粒子以电场为驱动力，在毛细管中按其淌度或/和分配系数不同进行高效、快速分离的一种电泳新技术。

高效液相色谱法 high performance liquid chromatography; HPLC 又称高压液相色谱法或高速液相色谱法。是指具有操作简便、分离速度快、分离效率高和检测灵敏度高等优良性能的液相色谱体系。液相色谱法早在 1903

年就由俄国植物学家 Tswett 发明，但早期的液相色谱法（古典液相色谱）柱效低、分离时间长，难以解决复杂样品的分离。到了20世纪60年代中后期，粒度小而均匀、传质速率快的色谱填料相继出现，使柱效显著提高、高压输液泵的使用解决了流动相流速慢的问题，从此液相色谱有了飞跃的发展，为区别于古典液相色谱法而称高效液相色谱法。HPLC 几乎可以分离和分析任何物质，是最有效和应用最广泛的分离分析技术。

高效液相色谱-傅里叶变换红外分析法 high performance liquid chromatography-Fourier transform infrared spectrometry; HPLC-FTIR 是高效液相色谱分离与傅里叶变换红外相结合的分析方法。该方法适合于分析具有红外特征吸收基团的有机化合物。

高效液相色谱和核磁共振波谱联用 high performance liquid chromatography-nuclear magnetic resonance spectroscopy; LC-NMR 将高效液相色谱仪与NMR谱仪两者组合在一起构成的联用技术。目前，LC-NMR 联用有3种模式：(1)连续流动模式，呈假二维等高线图，一个坐标为 NMR 化学位移，另一坐标为 LC 保留时间。用于了解化合物中某些基团，如芳香性基团等。(2)停止流动模式，当色谱信号达到峰值时使 LC 流动停止并在检测液槽的中心位置进行一维和二维 NMR 采样，直到取得良好的 NMR 谱图为止，然后重新启动泵，恢复原有 LC 条件，逐一完成 LC 峰的 NMR 测定。本方法按时间切割谱峰，称之"time slicing"。(3)峰存储（peak parking）模式，由 UV 检测器流出的 LC 峰，存储在联用的毛细管回路中，进行离线 NMR 检测。流动模式观测核 ^{1}H、^{19}F、^{31}P 及富集的 ^{13}C、^{15}N。最小检出量为几十微克。停止流动模式对 ^{13}C、^{15}N 及 ^{1}H 最小检出量则为 1μg。LC-NMR 联用对复杂混合物提供了经济、有效、完善、自动化程度高的分离分析鉴定的手段。

高效液相色谱-ESR 联用仪 high performance liquid chromatograph-electron spinresonance; HPLC/ESR 经高效液相色谱分离后的各种组分依此导入 ESR 谱振腔内，用 ESR 作为高效液相色谱的检测器，检测各组分中的顺磁物种。对于涉及自由基反应的体系，可以直接，或用自旋捕捉方法将短寿命自由基转换成稳定自由基后，使用 HPLC/ESR 进行分离鉴定，判断可能存在的各种自由基中间体或最终产物。

高效液相色谱-ESR-质谱联用仪 high performance liquid chromatograph-electron spin resonance-mass spectrometer; HPLC-ESR-MS 将高效液相色谱、ESR 和质谱联合使用的综合仪器分析方法。高效液相色谱用于把溶液中的各组分依此分离，然后自动送入 ESR 谱仪，进行 ESR 测定，随后将由 ESR 谱振腔流出的组分进一步导入质谱仪，进行质谱测定，以便准确地鉴定或证实自由基的结构。

高效柱 high performance column

指具有分离效率高、使用寿命长、耐高压、耐溶剂和性能稳定等优良性能的色谱柱。

高压差热分析 high pressure differential thermal analysis 程序控制温度下，在高压测量物质与参比物的温度差与温度的关系的一种技术。其压力可高达几百到几千大气压。高压差热分析可用于研究有机物的燃烧和爆炸、煤的氢化等。

高压差示扫描量热法 pressure differential scanning calorimetry; PDSC 程序控制温度下，在高压、变压或真空下，测量输入到物质和参比物的功率差与温度的关系的一种技术。其压力范围为 1.3Pa 到 7MPa。该法适用于氧化稳定性、反应热焓、压力诱导反应、催化反应和反应动力学等研究。

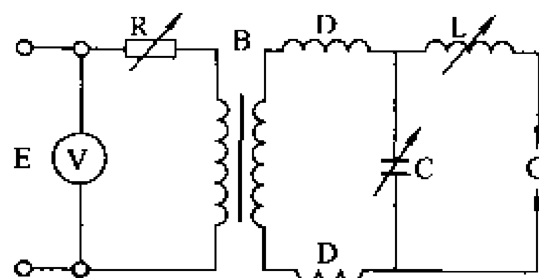
高压池 high pressure cell 高压金刚石池是测量微克级固体的有效采样附件，由池体、钢架和机械加压部分组成。测定时需与光束聚焦附件（DC）和红外显微镜配合使用，把池装在 DC 附件的样品位置。红外高压池包括气体高压吸收池、凝固态高压吸收池和高压金刚石池等。池体所使用的窗口材料由测试波段而定：KBr、NaCl 和 CsI 窗片最高可承受 425kPa。金刚石高压池一般可用至 10GPa 压强，顶砧面积越小，压强愈大。但砧面大，可放置样品面积大。经改进的金刚石高压池的压强可达 55GPa，超高压的金刚石高压池可达 170GPa。高压金刚石池微量采样技术应用在各个领域，如油漆、塑料、纤维、炸药的物证检验等。

高压电子显微镜 high voltage TEM 对于一般的透射电子显微镜，由于其电子束的加速电压比较低（一般 200kV），对样品的透过能力较弱，一般在 100nm 左右，因此对比较厚的样品，电子束不能透过，不能进行分析。通过增加电子束的加速电压，其透过能力可以获得较大的增强。利用高加速电压（一般 500kV 以上）的透射电镜称为高压电镜。高压电子显微镜可以获得更高的分辨率以及增加穿透能力，可以分析较厚的样品。

高压光谱 high pressure spectra 在特殊设计的高压池内于高压下获得的光谱。高压池窗片材料需根据测量光谱区和使用的压力来选择，有红外光学材料、ZnS、ZnSe、MgO、Al_2O_3、$BaTiO_3$、多晶锗和硅以及金刚石等，它主要用来研究高压下的相转变过程、晶格变形、高分子与气体间的相互作用、生化作用、反应动力学及压力对分子构象的作用机理等。

高压火花光源 high voltage spark source 在大气压下两电极间的一种气体放电现象。当两电极间的电压很高时，在电极间隙的带电粒子加速运动，产生碰撞电离，使电子和离子的数目急剧增加，放电即沿着电子聚集最密的通道进行。在通道与电极表面接触的区域，火花放电释放出大量的能量，使物质以发光的蒸气喷出，形成火舌。在通道和火舌的中心，气压

可达数十兆帕以上，温度可达10000K以上。因此，火花光源具有比弧光光源强得多的激发能力和电离能力，能够激发原子和离子的光谱。各种火花放电都是利用并联到放电间隙的电容器而产生的，故称电容火花放电。为了提高火花放电的功率，可以采用较高的电压、或者采用较大的电容。前者称为高压火花，后者称为低压火花。高压火花具有较高的电压，可以自动引燃，不需配备引燃装置，电路比较简单。高压火花的放电电压直接受到分析间隙的影响，因此在实际工作中最好采用控制式火花。高压火花实际上是一个高频振荡线路。交流电经变压器提高电压（12000～18000V），向电容器充电，使电容器的电压不断升高。同时，分析间隙的电压也不断升高，当电压达到该间隙的击穿电压时，立即在两电极之间有火花跳过，产生火花放电。当电容器放电接近零时，则在另半周重新充电，然后再次放电。如此循环下去，维持火花放电。其电路如下图。



高压火花光源电路图

E—电源；V—交流电压表；
R—可变电阻；B—升压变压器；
D—扼流线圈；L—可变电感；
C—可变电容；G—分析间隙

高压交流电弧 high voltage alternating current arc 交流电弧是利用交流电在分析间隙发生电弧放电时产生的高温来激发试样光谱的光源。它是发射光谱分析常用的一种光源。由于它比直流电弧的放电稳定性好，因此应用也比较广泛。根据所用交流电的电压高低，交流电弧分为高压交流电弧和低压交流电弧两类。高压交流电弧可以利用本身的高压（2000～4000伏）直接击穿间隙而燃弧，它的燃烧稳定性比低压交流电弧好，但由于设备昂贵，而且操作不安全，因此已被淘汰。

高压金刚石池 high pressure diamond cell 见**高压池**条。

高压流通池技术 high pressure flow cell technique 超临界流体色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术中的接口技术。色谱馏分连同超临界色谱的流动相一起通过流动池。这种接口受到压力增加而引起的流动相吸收会产生一定的干扰。

高压输液泵 high pressure pump 简称高压泵。在液相色谱中，将流动相以稳定流速或压力输送到色谱柱的泵。高压泵的稳定性直接关系到分析结果的重现性和准确性。对于一般的分析工作而言，流动相流速在0.5～2ml·min^{-1}，因此，分析型高压泵的最大流量一般为5～10ml·min^{-1}，高压泵的流量控制精度通常要求小于±0.5%。现在使用的高效色谱柱都是将很细颗粒的填料（3～10μm粒径）在高压下填充到色谱柱管中

的，流动相流经色谱柱时会产生很大阻力，为了保证流动相以足够大的流速通过色谱柱，要求高压泵能够提供足够高的出口压力，而且泵系统要能耐 30～60MPa 的高压。高压泵输出的液流应无脉动。为了溶剂更换的方便和适于梯度洗脱，泵的死体积要尽可能小，通常要求泵的死体积小于 0.5ml。

高压梯度 high-pressure gradient 又称内梯度。是在高压状态下完成流动相强度调整的梯度装置。一般只用于二元梯度，即用两个高压泵分别按设定的比例输送 A 和 B 两种溶液至混合器，混合器是在泵之后，即两种溶液是在高压状态下进行混合后输送到色谱体系的。

高压液相色谱法 high pressure liquid chromatography 又称高效液相色谱法。参见**高效液相色谱法**条。

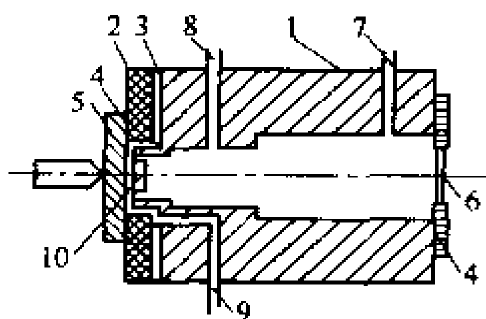
戈雷方程式 Golay equation 由戈雷针对空心毛细管色谱柱柱效提出的一个速率理论方程式，表征了有关色谱柱的各种参数和载气流速对柱效的影响。

$$h = \frac{2D_g}{u} + \frac{1+6k'+11k'\cdot r^2}{24\ (1+k')^2 D_g}u + \frac{2k'}{3\ (1+k')^2}\cdot\frac{d_f^2}{D_l}u$$

式中，h 为理论塔板高度；u 为载气线速；D_g 为组分在气相中的扩散系数；D_l 为组分在液相中的扩散系数；r 为柱半径；d_f 为液膜厚度；k' 为容量因子。第一项为分子扩散项，第二项为气相传质阻力项，第三项为液相传质阻力项。参见**范第姆特方程式**条。

戈雷柱 Golay column 即开口柱。参见**毛细管柱**条。

格里姆辉光放电光源 Grimm glow discharge source 一种新型的原子发射光谱分析的激发光源。1968 年由格里姆（W. Grimm）提出。格里姆辉光放电光源的结构如下图所示。阳



格里姆光源的结构示意图

1—阳极；2—阴极；3—绝缘片；4—真空垫圈；5—试样；6—石英窗；7—载气入口；8—阳极区接真空泵的进气口；9—阴极区接真空泵的进气口；10—负辉光

极和阴极均做成圆筒状，阳极套在阴极内，用 0.2mm 的聚四氟乙烯或云母片绝缘，石英窗口可让光束通过。阳极小室充有 60～2700Pa 惰性气体载气。块状试样紧贴在阴极的一端，距阳极约 0.2mm。在两电极之间加上一定的高压，便产生强而稳定的辉光放电，其负辉区集中在阳极圆筒内部，放电形成的正离子在电场作用下以较高的速度撞击阴极和试样表面，产生强烈的溅射。溅射进入等离子体中的物质与粒子碰撞获得能量，激发

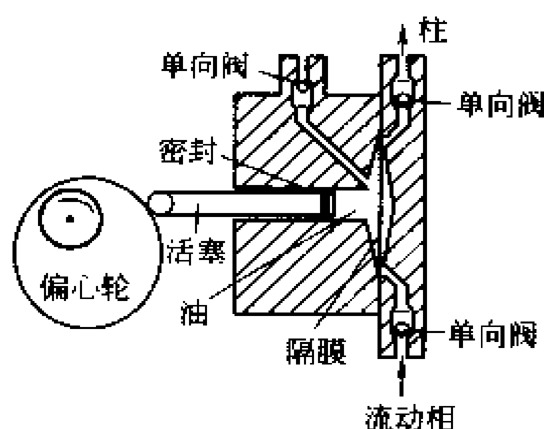
发光。格里姆光源激发光谱是非热激发，放电区内粒子浓度不大，谱线的自吸很小，背景浅。用这种光源进行分析的优点是发光稳定，测定精密度高；灵敏度高；试样基体效应和元素之间相互影响小，测定的准确度好；电能和气体消耗量小，电能为几十瓦，气耗量为每分钟几毫升；可以采用直流、射频、脉冲多种形式的放电；适合于多种样品分析，既适用于合金和矿物的主成分分析，又可进行表面涂层分析和非金属测定，试样易于更换。其缺点是谱线强度低，分析时间长；需要真空系统，批量样品分析不方便；主要用于固体分析，标样来源困难。辉光放电光源除了用作原子发射光谱的激发光源，也可以用作原子吸收光谱和原子荧光光谱的原子化器以及原子质谱的离子源。

格鲁布斯检验 Grubbs' test 一种检验异常值的统计方法。检验统计量

$$G=\frac{|x_d-\bar{x}|}{S}$$

式中，x_d 是该组测量值中被怀疑为异常的测定值；$\bar{x}$ 与 S 分别为由该组全部测量值计算的平均值与标准偏差。若由实验值计算的 G 大于格鲁布斯检验临界值表中给定显著性水平 α 下的临界值 $G_{\alpha,n}$，则可在置信水平 $p=1-\alpha$ 将 x_d 判为异常值。在一组测定值中只有一个异常值的情况下，格鲁布斯法有较高的检验功效。

隔膜泵 diaphragm pump 基于隔膜的运动来完成吸液和排液的一种高压输液泵。其结构如右图所示，通过一块隔膜将泵缸分为两部分，一部分充满了油，另一部分充满了流动相。柱塞与油接触，当柱塞向外移动时，隔膜被拉动，溶液被吸入缸内；当柱塞向里移动时，隔膜受到油压的作用，使溶液排出活塞缸，这种基于隔膜的运动对溶液产生"吸引"或"推压"，使单向阀吸液或排液的隔膜泵，可获得稳定的液流。



隔膜进样 septum sampling 用微量注射器针头穿过橡皮隔膜将样品直接注入汽化室（气相色谱）或色谱柱头填充床中心（液相色谱）的进样方法。因为死体积几乎等于零，所以能获得最佳柱效。这种进样方式不适合在高压下使用，所以液相色谱中目前已不采用，而在气相色谱中仍广泛采用。因为不易找到能耐各种有机溶剂的橡皮，所以通用性不是很强。

个人误差 personal error 由于分析人员主观因素、操作技术不好或操作习惯不良等因素引起的误差。

个体 individual 构成总体的一个单位。组成总体的个体数目称为总体的容量，可以是无限的，也可以是有限的，相应地称为无限总体与有

限总体。

各向同性超精细耦合常数 isotropic hyperfine coupling constant 各向同性的费米接触超精细耦合相互作用的大小用各向同性超精细耦合常数 a 表示。单位为能量单位，有时也可换算成频率、波数、磁场等单位来表示。各向同性超精细耦合常数一般正好等于超精细结构中多重峰谱线间的间距。

各向同性热参数 isotropic thermal parameters 又称为各向同性温度因子。是描述原子热运动对 X 射线衍射强度影响的参数。由于原子在其平衡位置附近的热运动，导致每个原子比静止时要占据更大的体积，因而表征原子散射 X 射线能力的原子散射因子 f 成为 X 射线波长 λ 和衍射角 θ 的函数。如果原子热运动的振幅大小与方向无关，则

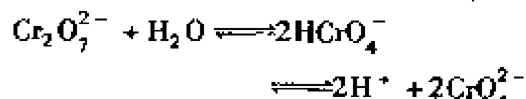
$$f=f_0\exp\left[-B\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2\right]$$

式中，f_0 表示原子处于静止状态时，计算所得的原子散射因子；B 和原子振动振幅平方的平均值 $\overline{u^2}$ 成正比：$B=8\pi^2\overline{u^2}$。在晶体结构测定中，称 B 或 $\overline{u^2}$ 为相应原子的各向同性热振动参数。

各向异性超精细耦合常数 anisotropic hyperfine coupling constant 各向异性的偶极-偶极相互作用大小用各向异性超精细耦合常数表示，它是个张量。通常用主轴坐标系 XYZ 中张量的三个主值（即对角化后的对角元）表示各向异性超精细耦合常数。在溶液中由于分子的快速滚动各向异性超精细耦合作用项被平均掉，在固体（或玻璃态）下，可从各向异性的超精细结构中得到近似的各向异性超精细耦合常数（这时直接得到的数值同时含有各向同性超精细耦合常数）。

各向异性热参数 anisotropic thermal parameters 又称为各向异性温度因子。是描述原子热运动对 X 射线衍射强度影响的参数。一般情况下每个原子的热运动不是各向同性的圆球，而是各向异性的，可用一个三轴椭球来描述：主轴定为该原子最高振幅方向，两个互相垂直的副轴则和主轴垂直，由于椭球三个轴的定向是通过结晶学坐标系来表示的，因而各向异性热参数还与衍射指标和晶胞参数有关。

铬的价态分析 valence analysis of chromium 测定铬的价态的有关技术。铬的最高价态是 +6，还有 +3，+2，以氧化数为 +3 的化合物最稳定，常见的是三价和六价铬化合物。在水体中六价铬一般是以 CrO_4^{2-}，$HCrO_4^-$，$Cr_2O_7^{2-}$ 三种阴离子形式存在。在水溶液中存在着如下的平衡



$$Cr_2O_7^{2-}+H_2O \rightleftharpoons 2HCrO_4^- \rightleftharpoons 2H^+ + 2CrO_4^{2-}$$

六价铬的钠、钾和铵盐均溶于水。三价铬常以 Cr^{3+}、$Cr(OH)^{2+}$、$Cr(OH)_2^+$ 等离子形式存在。三价铬的碳酸盐、氢氧化物均难溶于水。铬是生物体所必须的微量元素之一。铬的

毒性与其存在的价态有极大的关系，六价铬毒性大，在环境研究以及化学工艺中，分析铬的价态有重要意义。

工业色谱 industrial chromatography 又称流程色谱。是在工业生产流程中安装色谱仪进行在线检测，从而对生产工艺进行在线控制。在石油精炼、冶金、石化和化肥生产流程中经常采用。

工业色谱仪 industrial chromatograph 又称流程色谱仪。它作为工业生产流程中的一个组成部分，可对生产过程进行在线控制。例如当流程中某一被控组分的含量经色谱检测后，超过或低于生产指标要求时，色谱仪能自动发出信号（报警）并反馈给自动控制仪表（装置），使生产流程恢复正常。这种色谱仪应有较高的自动化程度，并与计算机联用进行工作。

工作电极 working electrode; WE 又称研究电极或指示电极。是提供电化学响应物反应场所的电极。其中作为一种变换器响应激发信号和待测溶液的成分，但在整个测试期间并不引起待测溶液本体成分的变化，这类电极称为指示电极。如 pH 电极、离子选择性电极、滴汞电极等都是指示电极。电解池中有电流通过，并使本体溶液成分发生显著变化的电极，称为工作电极，由此可见指示电极与工作电极是有区别的。在电解分析中，凡待测成分在其上面析出的电极及因电解而产生滴定剂的电极，都是工作电极。

工作计量基准 working standard of measurement 通过与国家基准或副基准比对或校准来确定其量值，用以检定计量标准的计量器具。工作基准在国家计量鉴定系统中的位置仅在国家基准和副基准之下。设立工作基准的目的，是为了不使国家基准和副基准由于使用频繁而遭受损坏，从而丧失其应有的计量学特性。

工作流速 working flow rate 塔板高度 h 和载气流速 u 的关系曲线的最低点对应的流速是最佳流速，在该流速下工作所用分析时间较长，虽然获得高效，但达不到快速。因此，常采用高于最佳流速的所谓工作流速进行色谱分离，也称最佳实用流速，在此流速下纵向扩散项不起控制作用，而传质项又不会使柱效明显下降，分析速度可大大提高。参见**最佳流速**条。

工作能力测验 ability test 对工作人员执行某项具体工作而做的考察、评定，以此了解该工作人员是否能胜任某个具体职位或是否能去接受另项专业的培训。

工作曲线 working curve 见**标准曲线**条。

公定分析方法 regulatory method of analysis 在农药残留分析中带有一定规范性和合法性，适合于测定农药残留量的分析方法。依据以上目的，在列出残留测定值的同时必须检验残留物特性的检定方法。对于公定分析方法，必须按照规范的要求列出方法的回收率、检测限、准确度和精密度，并对测定结果是否超出规定的最

高残留限量给予充分的说明。通常情况下，对于农药残留的公定分析方法不特别规定其指定性，为了适合于特定的目的可同时确定几种残留的分析方法。

功率补偿型差示扫描量热法 power-compensation differential scanning calorimetry 该法主要特点是试样和参比物分别具有独立的加热器和传感器，整个仪器由两个控制系统进行监控。其中一个控制温度，使试样和参比物在预定的速率下升温或降温；另一个用于补偿试样和参比物之间所产生的温差，这个温差是由试样的放热或吸热效应产生的。通过功率补偿使试样和参比物的温度保持相同，这样就可从补偿的功率直接求算热流率。

功能基团 functional group 在不同学科有不同含义。在色谱分析中是指色谱填料表面功能分子中对保留起关键作用的基团。在离子色谱固定相中，功能基团是阴离子或阳离子交换基团；在反相分配色谱中，功能基团主要是烷基。在生物化学领域，它是指一个生物分子上具有特别化学性质的原子或原子基团。

汞灯 mercury lamp 充有汞蒸气的气体放电灯。汞蒸气压低的低压汞灯因压力增宽等影响小、可辐射出线宽小的明锐谱线，在紫外区和可见区有一系列波长稳定、强度各异的汞线，常用作光谱仪器波长标定光源以及拉曼光谱分析等场合。高压和超高压汞灯中，因谱线压力增宽、自吸增宽严重，所以尽管发光强度大但谱线已不明锐清晰，通常用作照明光源。

共沉淀分离法 coprecipitation separation method 指利用某种载体沉淀将某一（些）离子积尚未超过其溶度积或处于饱和亚稳定状态的可溶物质（常为微、痕量组分）载带下来一并沉淀以实现这些（种）痕量组分的富集、与基体和干扰组分分离的一类沉淀分离、富集方法。例如，为测定水中痕量 Pb^{2+}，若在水中加入适量的 Ca^{2+}，再加入沉淀剂 Na_2CO_3，当生成 $CaCO_3$ 沉淀时，由于共沉淀现象，痕量的 Pb^{2+} 将被载带下来，用少量酸溶解所得沉淀后，可实现 Pb^{2+} 的测定。这里的 $CaCO_3$ 沉淀称为载体或共沉淀剂。共沉淀剂分无机和有机共沉淀剂，后者的选择性较好，沉淀经灼烧可方便地除去有机共沉淀剂。

共沉淀现象 co-precipitation 亦称为诱发沉淀（induced precipitation）。指在一定条件下原本不会形成沉淀的物质在其他物质沉淀过程中被载带下来的现象。共沉淀现象的产生原因有三种：混晶的形成、表面吸附和包藏。有时也将后沉淀（post-precipitation）现象（主要沉淀物沉淀后，因沉淀剂过量继而发生的沉淀现象）包含在共沉淀现象中。共沉淀现象将对沉淀物产生污染，但亦可利用于痕量物质的分离和富集。参见共沉淀分离法条。

共萃取现象 coextraction phenomenon 溶剂萃取过程中出现的类似于共沉淀的现象，即某种原本不能被萃

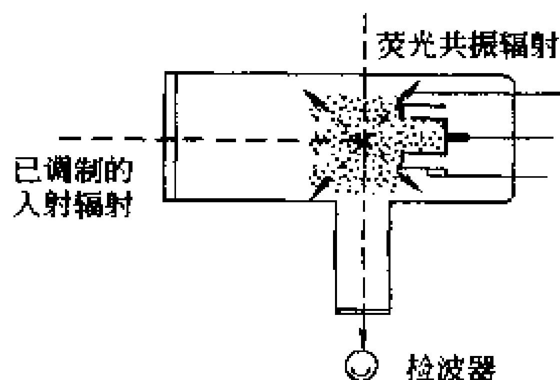
取的物质因其他物质被萃取而被同时萃取的现象。例如，用8-羟基喹啉有机溶液从含钪和钙离子的弱碱性溶液中萃取分离钪时，约有30%～40%的钙被同时萃取出来，而在相同条件下而没有钪离子时，钙基本不被萃取。目前，有关共萃取现象的机理、规律都还有待进一步研究。

共轭效应 conjugate effect 分子中由于共轭π键的存在而引起性质改变的现象。共轭效应使体系中电子云密度平均化、双键略有伸长，具有单键特性，单键略有缩短；具有双键特性。如苯乙酮，由于羰基与苯环形成共轭体系，其π电子的离域能增大，使其双键的特性降低，振动频率降低到1680cm^{-1}。

共沸精馏 co-boiling rectification 一种特殊的精馏分离方法。当欲分离组分之间沸点相近，或形成共沸物时，用一般精馏方法难以将它们相互分开。若向该体系中加入一种新组分（称为共沸剂），它能与被分离体系中某一组分形成低沸点共沸物，沸点降低，因而易于通过精馏蒸出，而与另外组分分离。这种精馏过程称为共沸精馏。例如，环己烷（沸点为80.8℃）和苯（沸点为80.2℃）沸点相近，且混合物形成沸点为77.4℃的正偏差共沸物，其中苯与环己烷的摩尔比为54:46，难以用普通精馏法将苯和环己烷分开。若向混合物中加入共沸剂丙酮（沸点为56.4℃），它仅与环己烷形成二元正偏差共沸物（沸点为53.1℃），共沸物组成为含丙酮0.746摩尔分数。此共沸物与丙酮均易于精馏蒸出而与苯分离。

共振变宽 resonance broadening 又称霍尔兹马克变宽。同种元素原子之间的碰撞引起的变宽，引起的强度分布类似于洛伦兹变宽，但不引起谱线的非对称化和分布极大的位移。在通常光谱分析条件下，分析原子浓度都很低，共振变宽的谱线宽度$\Delta\nu_R \approx 10^{-5}$nm，可以忽略不计。

共振单色器 resonance monochromator 利用分析元素的原子蒸气吸收特征辐射而将分析线分离出来的一种空心阴极灯。内充一定压力的惰性气体氩气，用灯丝加热空心阴极，产生被测元素的原子蒸气，氩气减缓原子蒸气向管壁的运动。由光源发出的特征辐射通过原子化器，一部分被吸收，透过的特征辐射进入共振单色器，为原子蒸气所吸收，受到激发的原子由高能级回到基态时，沿各个方向发射共振荧光，其中沿光源光轴成直角方向传播的共振荧光辐射进入检测器而被检测。如下图所示。共振荧光辐射的强度与吸收的特征辐射强度成正比。采用与光源调制频率相调谐的交流放大器放大检测器的信号，可



以消除共振单色器中的非调制信号的干扰。它应用很有限。

共振电离光谱法 resonant ionization spectrometry 是一种超痕量分析的方法。激发光源或其他形式的能量使分析元素的原子从基态跃迁到激发态，激发态原子的受激电子回到基态之前，可以从同一激发光源或另一激发光源吸收足够的能量脱离原子，从而产生一个自由电子和一个正离子，其响应可被仪器检测。如果原子是从基态开始受激，则称为共振电离光谱。

共振拉曼光谱电化学法 resonance Raman spectroelectrochemistry；RRSE 将共振拉曼光谱技术与电化学相结合的一种研究方法，对于监测电化学反应产物是一种非常有用的方法，已在光合成的一些重要反应及有机金属化合物研究中获得良好的应用，该法特别适用于光电化学领域中对半导体电极的研究。这一方法的应用实例有：玻璃碳电极上多层金属酞菁膜以及ZnO电极上染料分子（玫瑰红）以及TTF-TCNQ体系、紫精化学修饰电极的表征，以及欠电位沉积过程和单分子层修饰电极的研究。

共振拉曼光谱法 resonance Raman spectrometry 当改变激发线的波长并使之接近待测物的电子吸收光谱的波长时，待测物中的生色团或与生色团相连接的振动被有选择地增强，这种区别于正常拉曼光谱法的研究方法称之为共振拉曼光谱法。该法特别适用于生物化学的研究，因为生物样品的活性部位往往接近于生色基团，所以在研究生物物质的结构与功能的关系时，共振拉曼光谱法十分有用。

共振拉曼效应 resonance Raman scattering 当改变激光的激发线波长并使之接近或落在化合物电子吸收光谱带内时，某些拉曼谱带的强度比正常的拉曼散射要大几个数量级，这种现象叫做共振拉曼效应。利用共振拉曼效应的增强效果使浓度很低的化合物也可以获得满意的拉曼光谱。

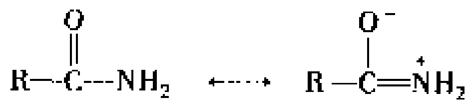
共振瑞利散射 resonance Rayleigh scattering 当散射光频率接近或等于散射分子的电子吸收带频率时，某些瑞利散射强度会急剧提高，这种现象称为共振（增强）瑞利散射。共振瑞利散射强度在一定条件下与溶液中散射分子的浓度成正比，且有很高的灵敏度，可用于某些物质的痕量分析。

共振吸收 resonance absorption 基态原子吸收特征频率入射辐射从基态跃迁到最靠近它的较高能态的过程。所吸收辐射的频率对各元素特征，取决于该元素的原子结构，共振吸收产生的谱线，称为共振吸收线。在原子吸收光谱中，基于共振吸收线的吸收强度进行定量分析。

共振线 resonance line 原子中电子在激发态和基态之间直接跃迁产生的谱线。在最低激发态和基态之间跃迁产生的谱线，称为第一共振线，习惯上简称共振线。它的激发能最低，最易被激发，是元素最强的谱线和最灵敏的分析线。在原子吸收光谱分析

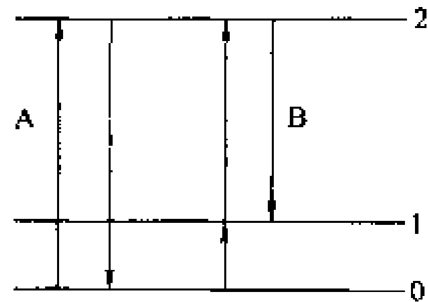
中，基态原子吸收来自辐射光源（最常用的是空心阴极灯）的共振辐射，跃迁到第一激发态，产生共振吸收线，测量它的吸收强度以进行定量分析。在原子发射光谱分析中，处于第一激发态的原子跃迁到基态，产生共振发射线，它最常用于光谱定性分析和痕量元素的光谱定量分析。

共振效应 resonance effect 亦称中介效应。如伯、仲、叔酰胺羰基吸收频率均不超过 1690cm^{-1}，处于羰基的低波数区。这是由于其中介效应而降低了羰基的双键性，因而吸收频率向低波数位移。



共振荧光 resonance fluorescence 原子或分子被激发到高能级以后，不经过弛豫直接返回基态所发出的光。由于没有能量损失，因此共振荧光的波长与激发波长相同。当在激发后能级上的弛豫时间与自然发射寿命相同或比自然发射寿命长时，共振荧光的强度大。一般多在低压气态的原子或分子中观察到共振荧光。用于超音速喷气机中分子的高分辨率分光测定以及诱导耦合高频等离子体分光分析等。

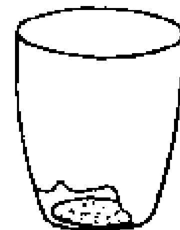
共振原子荧光 resonance atomic fluorescence 原子吸收辐射受激后再发射相同波长的辐射，产生共振原子荧光。若原子经热激发处于亚稳态，再吸收辐射进一步激发，然后再发射相同波长的共振荧光，此种共振荧光称为热助共振荧光。只有当基态是单一态，不存在中间能级，没有其他类型的荧光同时从同一激发态产生，才能产生共振原子荧光。如图。



A—起源于基态的共振荧光；
B—热助共振荧光

沟道效应 channel effect 当用入射角很小的离子束射向单晶样品时，若在某一方向上，表面第二层原子恰好处在最表层的原子下面，使基体散射离子流大大降低的现象。沟道效应能提供晶体结构信息。

古氏坩埚 Gooch crucibles 一种过滤沉淀物用的瓷制过滤器。如图所示，坩埚底部具有一些小孔，其上支持玻璃过滤膜，过滤膜能处理细微的沉淀物。



古氏坩埚



烧结玻璃坩埚



瓷过滤坩埚

过滤坩埚

古依天平 Guoy balance 测定弱磁性体的磁化率（χ）和磁化强度（$\boldsymbol{M}$）的装置。但与通常的磁天平（参看**磁天平**条）不同的是，古依天平使用均匀磁场 $\boldsymbol{H}$。测试时，将截面均匀的棒状样品的一端放入电磁铁两磁极之间的均匀磁场中，而另一端则处于很弱，甚至可以忽略的磁场中。设样品磁化率为 χ，周围介质的磁化率为 χ'，样品截面积为 S，则样品在磁场中所受的力为 $\left(\frac{1}{2}\right)(\chi-\chi')SH^2\approx\left(\frac{1}{2}\right)\chi SH^2$。因此，只要知道磁场 $\boldsymbol{H}$，测出样品所受力，就可确定样品磁化率。这种方法也可测量液态或粉末状样品。测量时，把它们装入玻璃管中，并对玻璃管的磁性产生的影响进行修正。

谷丙转氨酶传感器 glutamic-pyruvic transaminase sensor; GPT 将丙酮酸盐氧化酶固定于转换器而制成的传感器，可用于测定谷丙转氨酶，广泛用于临床鉴定病毒性肝炎。

骨架振动 skeletal vibration 由多原子分子中的骨架作为整体所产生的振动。它又可分为伸缩骨架振动，如芳香族化合物的苯环骨架做周期性缩放运动-呼吸振动等和弯曲骨架振动，如直链烷烃碳链骨架做周期性的褶皱式的弯曲运动。配合物 X—M—X（X 是配位基，M 是金属）中的 ν_{X-M} 和 δ_{X-M-X} 亦可看成骨架振动。

固定化酶 immobilized enzyme 通过吸附、键合、交联或包埋等方式将游离酶固定于某介质上或其中，以提高酶分子的利用率、稳定性和机械性。

固定相 stationary phase 柱色谱或平板色谱中既起分离作用又不移动的那一相。固定相的选择对样品的分离起着重要作用，有时甚至是决定性的作用。不同类型的色谱采用不同的固定相，如气-固色谱的固定相为各种具有吸附活性的固体吸附剂；气-液色谱的固定相是载体表面涂渍的固定液，液相色谱中的固定相为键合各种化学基团（如十八烷基）的硅胶小球，离子交换色谱中的固定相为各种离子交换剂，排阻色谱中的固定相为各种不同类型的凝胶等等。参见**固定液**条与**载体**条。

固定液 stationary liquid 在气-液色谱（有时在液-液色谱）中，以薄膜状涂渍在载体表面作固定相起分离作用的那层液体。固定液主要是由高沸点有机物组成，对固定液的要求是：在操作温度范围内其蒸气压低、热稳定性好、化学稳定性好、不与被分析组分发生化学反应、对被分析组分有较大的溶解度、选择性高、在使用温度下呈液态。在开口管柱中，则将固定液直接以薄膜状涂于管壁。气相色谱的固定液种类很多，依照样品分子和固定液分子的结构、极性以及相互作用力的类型来选择合适的固定液。

固定液的相对极性 relative polarity of stationary liquid 固定液的极性是相对于极性的 β,β'-氧二丙腈和非

极性的角鲨烷而言。具体测定方法是，首先规定强极性的β，β'-氧二丙腈的相对极性为100，规定非极性的角鲨烷的相对极性为零，然后选取丁二烯和正丁烷作为标准物质在上述极性柱、非极性柱及被测固定液柱上分别测定其相对保留值的对数，再用下列公式计被测固定液的相对极性 P_x

$$P_x = 100 - \frac{100(g_1 - g_x)}{g_1 - g_2}$$

式中，g_1 为丁二烯和正丁烷在β，β'-氧二丙腈柱上的相对保留值的对数；g_2 为丁二烯和正丁烷在角鲨烷柱上的相对保留值的对数；g_x 为丁二烯和正丁烷在被测固定液柱上的相对保留值的对数。参见**固定液极性**条。

固定液极性 stationary liquid polarity 表征各种溶质与固定液之间作用力的参数，可用溶质的保留性能来描述。选用一组沸点相近极性不同的典型化合物，测出在某种固定液及标准非极性固定液上保留指数的差值（ΔI），以此差值作为该固定液极性的量度。通常是以罗什那德（Rohrschneider）和麦克雷诺（MacReynold）常数来表征，常数值越大，极性越强，常数越小，极性越弱，例如异三十烷的MacReynold常数为0，它可作为标准非极性固定液。参见**固定液的相对极性**条。

固定因素 fixed factor 其水平可以完全控制的因素。在分析测试中，试剂浓度，溶液酸度，反应温度，反应时间等均为固定因素。固定因素水平变化引起试验指标的变化，由试验所做出的结论，只适用于已试验过的因素水平，而不能从已试验过的因素水平效应从统计上去推断该因素未经试验的其他水平的效应。

固体表面化学发光 solid surface chemiluminescence 发生在固体表面的化学发光现象。亦可泛指发生在固-液界面和固-气界面的化学发光现象。固-液界面化学发光的一个典型例子是将多孔硅浸在稀硝酸介质中时，多孔硅表面产生的化学发光现象；固-气界面的化学发光通常发生在具有催化活性的固体材料表面，如一氧化碳在二氧化钍表面作用时可观察到强烈的化学发光现象。

固体电解质 solid electrolyte 低于熔点温度下具有离子导电性的物质。

固体高分辨 NMR solid high resolution NMR 固态物质的偶极-偶极相互作用，核电四极矩相互作用，电四极矩与晶格中电场的作用，固态物质内部的自由电子对核的作用，化学位移的各向异性作用，核自旋耦合时各向异性作用等导致固态 NMR 谱宽极宽，它虽然蕴藏着各种丰富的分子内及分子间的相互作用的信息，但难于分析。为此采用魔角旋转、多脉冲、交叉极化、强功率去耦、多量子跃迁、稀释自旋等方法，或者将它们结合起来，可以相当有效地抑制上述增宽因子，获得固体高分辨 NMR 谱，其谱线接近于液体或溶液状态的 NMR 谱线线宽，便于获取固态物质的内部结构信息。

固体基质室温磷光法 solid-substrate room temperature phosphorimetry; SS-RTP 室温磷光分析法的一种。微升级试样点在滤纸或层析基质、固体盐粉末等固体基质上，用适当的方式干燥，使得磷光体被强烈夹持在基质上以保持刚性，然后将基质固定在样品架上进行 RTP 测量。通过基质的选择、预修饰和处理、外部重原子效应等，常可显著改善测量的灵敏度和选择性。

固体激光器 solid laser 采用固体材料作为工作介质的激光器，主要有红宝石激光器、掺钕的钇铝石榴石（YAG）激光器、掺钕的玻璃激光器等。这类激光器的特点是输出功率高，体积小而又很坚固。

固体进样器 solid sampler 将固体试样引入原子化器的装置。在原子吸收光谱法中，一种方式是用各种进样器将固体试样直接引入原子化器中；另一种更常用的方式是将固体试样预先制成悬浮液，再用雾化器将悬浮液引入火焰中，或者直接将悬浮液注入石墨炉内。在原子发射光谱法中，固体试样可以作为电弧、电火花和辉光放电光源的电极，通过燃弧和阴极溅射将固体试样引入原子化器中，也可以将固体试样制成悬浮液用雾化方法引入等离子体中，或者用其他方法如电热蒸发法、激光烧蚀、直接插入等将固体试样引入原子化器中。

固体 NMR 谱 solid NMR 固态物质中各核之间的磁偶极相互作用，核的电四极矩之间相互作用、它们与晶格中的电场的相互作用，固态物质如金属中的自由电子对核的作用等是固体 NMR 中的主要作用，决定了谱线的形状和谱线的裂分情况。固体核磁共振谱谱线的线宽远大于液体谱。如水中质子的线宽为 0.1Hz，而冰中质子线宽则达 10^5 Hz。分析谱线形状与裂分，可了解上述各种相互作用的性质，进而研究晶体的结构、分子的结构、固体中的内旋转、晶体的相变及体系中的自由电子的状态等问题。不过目前已采用了许多特殊技术使固体 NMR 谱中的多种作用因素简化而达到近于液体 NMR 谱，这就发展成固体高分辨 NMR。固体试样在溶解或熔化过程中若发生分子结构变化，未能找到合适溶剂的物质都必须用固体 NMR 法进行研究。固体 NMR 谱仪要求可观测谱宽极宽，发射脉冲强度及辐射脉冲强度极强，远超过研究液体谱谱仪的要求。

固体支撑双层磷脂膜 solid supported bilayer lipid membrane 又称自组装双层磷脂膜（self-assembled bilayer lipid membrane），简称 s-BLM。是以固体金属，通常为铂和不锈钢为支撑载体形成的双层磷脂膜。

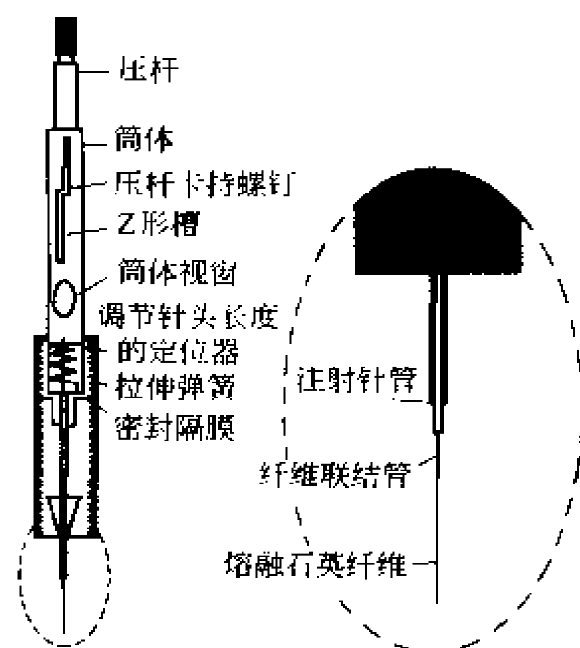
固相萃取 solid phase extraction; SPE 一种由液固萃取和柱色谱技术相结合发展起来的试样预处理技术，主要用于制备试样。SPE 是一个柱色谱分离过程，其分离机理、固定相和溶剂的选择等方面与高效液相色谱（HPLC）有许多相似之处，但 SPE

柱的填料粒径（>40μm）要比HPLC填料粒径（3~10μm）大，柱短，所以柱效比HPLC低得多（一个SPE柱仅能获得10~50塔板），只能用于分离保留性质差别很大的化合物。相对于液-液萃取，SPE的优点是：（1）分析组分回收率高；（2）分析组分与干扰组分分离更有效；（3）不需使用超纯溶剂，有机溶剂用量少；（4）能处理小体积试样；（5）无相分离操作，易收集分析物馏分；（6）操作简便省时，易自动化。SPE主要用于：（1）去除干扰组分；（2）富集痕量组分；（3）改变试样溶剂，使与分析方法相匹配；（4）原位衍生；（5）试样脱盐；（6）特殊试样的储存和运送。市售SPE产品主要有SPE管、SPE盘和固相微萃取器。

固相分光光度法 solid spectrophotometry 利用固相载体（离子交换树脂、泡沫塑料、凝胶、萘或滤纸等）对待测组分进行分离、富集并在固相载体上显色，随后直接测定固相吸光度以确定待测组分含量的一类光度分析方法。方法简单、快速、灵敏度高、选择性好。例如，可利用泡沫塑料从试液中分离富集痕量Au(Ⅲ)并与硫代米蚩酮试剂反应，然后直接测定泡沫塑料上Au(Ⅲ)-硫代米蚩酮的吸光度，即可测定出原试液中金的含量。固相分光光度法还可应用于高效液相色谱和流动注射分析中，亦可与光导纤维构成传感器。利用导数技术或双波长技术可降低或消除背景的影响。

固相扩散 solid diffusion 溶质从液固或气固界面向固相内部的传质过程。在色谱分离过程中，溶质在固相扩散中的阻力（传质阻力）是引起色谱谱带展宽的因素之一。

固相微萃取 solid phase micro-extraction；SPME 20世纪90年代初发展起来的一种新的固相萃取技术。它是基于气固吸附（吸收）和液固吸附（吸收）平衡，利用分析物对活性固体表面（熔融石英纤维表面的涂层）的吸附（吸收）作用而实现分离、富集的方法。试样被纯化、富集后可与各种分析方法相结合，特别适于有机物的测定。固相微萃取分离法属于非溶剂型萃取法。直接固相微萃取法是将涂有高分子固相液膜的石英纤维插入水溶液或气体试样中，使待分析物质吸附在纤维的涂层上，经过一定时间，待在固相涂层和水溶液两相间的分配达平衡后，直接将纤维插入气相色谱的进样口进行热脱附，然后进行气相色谱分析；顶空固相微萃取法是将涂有高分子固相液膜的石英纤维停放在试样溶液上方进行顶空萃取，这是一种三相萃取体系，要达到气、液、固三相的分配平衡。由于不与试样直接接触，避免了试样基体干扰。固相微萃取分离法是一种通用型样品处理方法，几乎适用于各类样品，可用于环境污染物、农药、食品及生物物质的分离与富集。固相微萃取装置参见下页图。



固相荧光免疫分析 solid phase fluorescence immunoassay 基于固相抗体和抗原反应，经清洗除去干扰杂质后，测定抗原-抗体结合物的发光强度的免疫分析法。采用单克隆抗体的固相法是免疫测定法的一个最新发展。具体的测定方法如下：（1）抗体（专一的免疫球蛋白）吸附于玻璃纤维纸上，形成固相抗体；（2）将样品（含待测药物的病人血清）加在固相抗体上，样品中抗原（药物）与抗体产生反应；（3）向固体抗体上再加酶标抗原（或用荧光化合物标记抗原），在适宜条件下保温一段时间，使酶标抗原与未结合的抗体结合；（4）加入底物洗脱液（例如4-甲基伞形酮），从反应区洗除病人血清蛋白和游离抗原，同时与酶标结合物反应产生荧光，测量反应区发光强度。

固液萃取 solid-liquid extraction 亦称选择性溶解，将固体（或液态金属）样品中的基体或待测痕量元素选择性溶解于适当溶剂。例如，在待测痕量元素的选择性溶解中，要求待测痕量组分在所选溶剂中是可溶性的，而基体则不溶。为测高纯镓中 $\mu g \cdot g^{-1} \sim ng \cdot g^{-1}$ 级的 Cd、Co、Fe、Tl 和 Zn 等杂质，可用热的 0.2mol·L^{-1}HI-0.05mol·$L^{-1}$$I_2$ 溶液萃取，基体镓不溶解，而这些待测痕量组分在所选溶剂中是可溶性的。

固有黏度 intrinsic viscosity 又称极限黏度。是某一高分子特有的，与其溶液的浓度无关的黏度值。

官能团 function group 又称功能团。有机分子结构中能反映出特殊性质的原子或原子团。例如，含有氨基—NH_2 的化合物呈碱性，含有偶氮基—N═N—的化合物显示颜色等。

官能团保留指数 functional group retention index 在气相色谱中，通过研究保留指数随分子结构变化数据，证明原组分与衍生物的保留指数间有近于恒定的差值，可用于标志固定液的特征，并用作定性分析的初步分类。

官能团频率区 function group frequencies 反映分子中基团特征振动频率的波数区。这一区域为 4000～1300cm^{-1}，官能团的鉴定主要在该区域内进行。

官能团色谱图 functional group chromatogram；FGC 是重建色谱图的一种，由 Coffy 等人提出，Nicolet 公司建立的一种色谱图显示技术。它

是在GC/FTIR联机过程中的实时处理技术。计算机对整个色谱过程中的每一个干涉图取512个数据点进行快速傅里叶变换计算，经过相位校正后，将所得单光束的光谱扣除掉仅含载气的同样分辨率的背景参比光谱后，得到分辨率仅为$32cm^{-1}$的吸收图，并在操作时预先设定的五个波数范围的窗口对光谱进行积分，计算光谱的吸光度，再将结果通过绘图仪在五个图上实时显示出来，纵坐标为这些窗口的吸光度面积，横坐标为色谱保留时间（或按干涉图的文件号码顺序）。这种计算所需要的时间仅为1.2s左右，可与下一数据组的采集同时进行。操作者在设定窗口时，需考虑某官能团或结构的特征红外吸收范围。当该窗口的图上出现色谱峰时，该峰代表的化合物就可能含有与此吸收范围相关的官能团。这种情况相当于色谱分析中的选择性检测器或质谱的选择离子检测。从图上就可以了解样品组分的化学结构信息，因此也称为化学图。

冠硫醚 thiacrown 将冠醚中的氧原子全部以硫原子取代得到的化合物。根据软硬酸碱原则，硫原子是比氧原子较软的碱，因此容易结合过渡金属等软酸。各种修饰冠硫醚是识别过渡金属的重要主体分子。

冠醚 crown ether 1967年由Pederson发现。是一种环状多醚，一般为无色低熔点固体。含芳环的冠醚难溶于水和乙醇，较易溶于二氯甲烷、氯仿和吡啶等。具有选择性地络合阳离子（主要是金属阳离子）的重要特性。电子供体的氧原子使整个环成为具有多结合点的配体，可以将金属离子、有机阳离子包结在环内。如18-冠-6是含有6个氧原子的18元环，环的尺寸与K^+的离子半径匹配，因此对其有较高的亲和性，与之形成皇冠状络合物。由于冠醚与金属离子形成了离子-偶极配位络合物，使金属盐在有机溶剂中的溶解度增大。冠醚一般可采用威廉逊醚合成法制取，在有机合成中常用作相转移催化剂等，冠醚及其各种修饰冠醚是金属离子的重要离子载体。

冠醚固定相 crown ether stationary phase 功能基团中有冠醚结构的固定相。包括聚冠醚树脂、键合型和包覆型冠醚固定相。

观测值 observation 通过测量或测定所得到的样本值。

管壁效应 wall effect 色谱柱的管壁对溶质随流动相迁移时所产生的柱管中央和边缘部分流速不一致的效应。在空心毛细管柱色谱中，由于管壁效应而使流动相产生流型扩散亦即径向扩散，结果造成区域的扩展。在填充柱色谱中，由于气流流动无规律，因此管壁效应不甚明显。在高效液相色谱柱中，由于流动相具有较大的黏度系数，因而管壁效应显得较为严重。为减少管壁效应的影响，可对色谱柱材料进行选择和对其内壁进行各种处理。参见**流型扩散**条、**区域扩展**条。

管壁原子化 tube-wall atomization

原子吸收光谱分析中一种实现原子化的常用方法。将样品置于石墨管壁上，石墨管两端与电极紧密接触，通过电极向石墨管供电，石墨管作为电阻发热体发热升温，被测元素化合物自管壁蒸发，解离和原子化。

管理样 quality management sample 又称为质量控制样。为确定分析测量中的不确定度、用于日常例行分析质量控制与管理的样品。管理样既可以是不同级别的标准物质，亦可以是本部门或本单位研制的、用准确方法测定了其特性量值，并经本部门或本单位计量管理机构批准的用于日常例行分析质量控制的样品。

管式炉裂解器 tube furnace pyrolyzer 是最常用的连续式裂解器，其主要部件是一根可连续升温的加热管，当管中温度达到平衡温度时，将盛有被测样品的铂舟送入炉管内进行裂解，裂解产物由载气带入色谱柱、检测器和记录仪，得到裂解指纹图。这种裂解器的优点是平衡温度连续可调，易于控制和测量热解温度，适用于不同物态样品。其缺点是死体积大、温度上升时间长、加热区宽、二次反应较突出。

管式石墨炉 graphite tube burner 一种将试样放置在石墨管内，电热升温使试样蒸发和转化为自由原子的高温炉，是应用最广的一种电热原子化器。商品仪器中采用的石墨管原子化器多为马斯曼型高温炉，是1968年首先由马斯曼（H. Massmann）提出的。作为石墨炉原子化器使用的石墨管有普通石墨管、热解涂层石墨管、全热解石墨管、耐高温金属涂层石墨管及衬金属石墨管等。参见**马斯曼高温炉**条。

灌注色谱法 perfusion chromatography 一种新的高效液相色谱分离方法，主要用于各种有机、生化物质的分离与纯化。灌注色谱填料为高分子微球，球的内部分布着两种孔道，一种是贯穿整个颗粒的特大孔，称为贯通孔或对流孔，直径在600～800nm；另一种是连接这些特大孔的较小的孔，称为扩散孔或连接孔。普通色谱填料只有扩散孔而无贯通孔，传质方式是溶质从填料的外部通过扩散进入颗粒内部。而在灌注色谱填料中，溶质可无阻力地进入贯通孔，优点是溶质在贯通孔内流动相中的传质阻力大大减小，其传质速度要比普通色谱填料快1个数量级。因而柱效与分离速度同时大幅度提高。据报道，灌注色谱用于亲和分离，线速可达每小时数十米。

灌注色谱填料 perfusion chromatography packing 又称流通粒子。是一种经特殊设计，颗粒内部同时具有大小两种尺寸的孔。大孔是600～800nm的“贯通孔”，小孔是80～150nm的“扩散孔”，贯通孔的存在使流动相能快速地贯穿填料颗粒流动，从而加快填料内的传质过程，克服了全多孔硅胶填料孔径小的缺陷。

光差量热扫描分析法 differential scanning photocalorimetry 在程序控制温度下，用光照射试样测量输入到试

样和参比物的功率差和温度关系的一种技术。该法是测量试样在紫外线或可见光照射下的光化学反应。所采用的光学系统质量较高，光源稳定，辐照均一，光源波长范围为 200 ~ 600nm，并与差示扫描量热仪（DSC）相连接。该法可对光敏材料的光稳定性、光化学反应、光裂解和光固化反应等进行研究。

光程 optical path 光在介质中传播时所经过的几何路径长度（l）与该介质对此波长所具有的折射率（n）的乘积，称为光程，即 $L = nl$。因为同一介质对不同频率（波长）的光具有不同的折射率，所以光程与光频率（波长）有关，不同频率（波长）的光通过同一几何路径时光程值不同。

光导纤维光学传感器 fiber-optical sensor 又称为光极（optode 或 optrode）。入射光通过光导纤维的一端传至与试样溶液接触的另一端，基于被测组分的存在或其与装于该端的固定化试剂间的相互作用，通过监测由此引起的出射光的光吸收、光反射或发光等光学性质或强度的变化来实现待测组分的定量测定。大致可分为光度传感器和化学传感器两大类。它一般作成 Y 型，上面的两个分枝分别用于入射和出射光，下端（探头部）与试样溶液接触。光导纤维管由圆筒形表层和圆柱形芯组成，因芯的折射率大于表层，光线以全反射方式在芯内向前传输。可根据需要选择由玻璃、石英或高分子材料制成的光导纤维。该传感器具有抗电磁、抗微波的能力，可置于高温、高压、强电磁场、易燃、易爆和放射性环境，易于实现多组分的同时遥测；可将探头作得很小很细，直接插入人或动物活体组织内进行连续的监测等优点，在化学、生物和环境等领域都有广阔的应用前景。

光的反射 reflection of light 光在折射率为 n 的介质中传播遇到另一种折射率为 n' 的介质时，在这两种介质的分界面上会发生反射，其传播方向发生变化。反射光方向遵循反射定律：反射角等于入射角，反射光线、入射光线与入射点处界面的法线三者同在一个平面上。至于反射光的相对强度及其偏振状态可由光的电磁波理论计算。当入射角 i 满足 $\mathrm{tg}i_1 = \frac{n'}{n}$ 的特殊情况时，反射光将成为在垂直于入射面方向上振动的线偏振光，而且反射光线与折射光线方向互相垂直；这种特殊情况称为布儒斯特（Brewster）定律，满足 $\mathrm{tg}i_1 = \frac{n'}{n}$ 的 i_1 角称为起偏角或布儒斯特角。

光的干涉 interference of light 如果两束或多束光具有相同的频率相同的振动方向、振幅相差不多而且彼此间的相位差是固定的，它们在传播空间交会时，会在重叠区形成光强有规律的强、弱变化，构成确定形状的明暗图形，这种现象称为光的干涉。能够彼此发生干涉的两束或多束光称为相干光，干涉光必须是同频、同振动

方向、有固定相位差，这是形成干涉的必要条件，而且还应满足在交会重叠时彼此的振幅相差不悬殊、彼此间的光程差也不太大的充分条件。如果两束或多束非相干光在传播过程中发生相会重叠，是不会发生光的干涉的，各自的传播方向、振幅及其他特性都不会因相会而发生变化，即彼此不发生任何影响，这就是几何光学中的“光的独立传播”基本原理。非相干光在交会重叠区形成的总光强是各光束光强之和，不会形成有规律变化的明、暗交替花样。在自然界水面油膜、肥皂泡表面呈现绚丽的色彩，改变观察方向颜色随之变化，就是光的干涉实例。

光的偏振 polarization of light 光的电磁波理论证明光波是横波：光波的振动面与光的传播方向垂直。光波振动是由在互相垂直的两个平面上分别振动的电矢量和磁矢量构成，光的各种效应主要由光的电矢量决定。在某些特定情况下，光矢量（常指光的电矢量）只在其振动面的某个方位振动、或在某个确定的方位的振动最强，这时称光发生偏振，变成偏振光了。在各方位振动概率相同的光（即没发生偏振的光），称为自然光。光在介质表面反射时，会产生或多或少的偏振状态。光的偏振现象是光波的横波性的体现，光的偏振状态与光的强度、频率、位相一样，是光的基本参数，直接影响各种光效应状态。

光的散射 scattering of light 光散射的现象是光在传播过程中遇到散射介质时，在光的传播方向以外形成光强分布。例如我们可以在不同方向看到白云、烟雾，都是光在云中水微滴、烟中微尘上发生散射的结果。光散射的本质是介质中的微粒（包括微小混杂物、物质的分子、原子等）吸收了入射光能量后，发生了再辐射，形成次波及其合成波，在不同的方向辐射出来。散射光不但传播方向不同于入射光方向（散射前的光传播方向），而且散射光的位相、甚至频率（波长）都可能与入射光不同。只改变光传播方向和位相的光散射，称为弹性散射（按光的粒子理论是光子发生了弹性碰撞），如混浊介质（如烟雾、牛奶……）散射、瑞利散射等；同时还使光的频率（波长）也发生改变的散射，称为非弹性散射（光子与散射介质发生了能量交换），如拉曼散射、布里渊散射等。光的散射既然是光与物质相互作用的结果，散射光的强度、偏振状态、光谱特性都直接与散射介质的本性相关。所以利用散射分析可以检测和研究物质的组成、结构及分子构形。

光的吸收 absorption of light 光入射到任何物质上，都会与该物质发生宏观和微观的作用，入射光的能量都会在物质作用下发生变化。事实上，除了真空，没有任何一种透明物质是对所有波长的入射光完全透明的。任何物质只能对某些波长范围的光透明，而对其他更大范围的波长不透明（例如，玻璃对可见光范围的窄小波长范围透明，而对更大的紫外

区、红外区不透明）。所谓不透明即物质将入射光能量吸收掉不让通过。即使对透明区，光能量也会被透明物质的粒子吸收掉一部分而转化为物质内能。物质将入射光能量全部或部分吸收，从而降低投射光能量的现象，称为光的吸收。

光的衍射 diffraction of light 按人们的直观概念和几何光学原理，光线是直线传播的。如在光的传播行程中遇到挡光屏，屏后成为阴影的区域应完全没有光线到达，光行程中遇到小孔、狭缝或直边刀口之类物体时，应该产生孔、缝或直边的明暗分界清晰的几何影像，在几何影像的阴影区域内应完全没有光，而阴影外应有均匀的光强分布。但是，若挡光物、孔、缝等的尺寸很小（可与光的波长值相比拟）时，事实上在阴影区域有光强分布，阴影区外的光强分布也不是均匀的而是有规律的明、暗交替光花样。这种用光的直线传播解释不了的现象称为光的衍射（绕射）。光的衍射是光的波动性的表现，可以用光的波动理论说明。小屏、小孔、狭缝等对传播中的光波的波阵面的阻挡或限制，引起了光波传播状态的变化，光的波阵面发生变化，导致光能量在继续传播时重新分配，在光线直线传播时不能到达的阴影区也会得到光能量，而在阴影区外的光能量分布状态也会发生可以预计的复杂变化。

光的折射 refraction of light 光在传播过程中从一种折射率为 n_1 的介质到达折射率为 n_2 的另一种介质表面时，在这两种透明介质的分界表面上不但会发生光的反射，而且光还会进入第二种透明介质以不同方向继续传播，这种现象称为光的折射。光在两种透明介质分界面上发生折射时，折射光的方向遵循折射定律：折射光线与入射光分列入射点界面法线的两侧，折射光线、入射光线和法线在同一平面上，折射光线与法线的夹角 i' 与入射光线与法线间的夹角 i 的定量关系为 $\frac{\sin i}{\sin i'}=\frac{n_2}{n_1}$。当光从折射率 n 较小的介质（如空气）射到折射率 n' 较小的介质（如玻璃）上发生折射时（称为从光疏介质射到光密介质），折射角 i' 小于入射角 i。

光电倍增管 photomultiplier tube 一种将微弱光信号转换为电信号的真空器件。由光电阴极、聚焦阴极、电子倍增极、阳极（收集极）和真空管（外壳）等组成。光电倍增管的工作是基于二次电子发射的倍增作用。当光子撞击真空管内的光电阴极时，光电阴极产生光电子发射，这些光电子被聚集电极聚集后引向倍增极，撞击倍增极（亦称打拿极）产生多个次级电子，使电子数目倍增。次级电子再撞击下一级倍增极，使发射的电子数再次得到倍增，每经过一级倍增极，产生的电子数依次倍增一次。经过9～14级倍增极，电子数倍增到 10^6，最高可达到 10^9。已倍增的电子流由阳极收集，作为输出电流。输出的阳极电流与入射光强度及光电倍增管的增益成正比。改变施加

在倍增极上的工作电压，可以改变其增益。光电倍增管适合于测量微弱光，强光会使光敏表面受到不可逆转的损害。表征光电倍增管特性的参数有：（1）光谱响应波长范围，一般光电倍增管的光谱响应范围限于200～1000nm；（2）阴极光谱灵敏度，是指对一定波长辐射光的灵敏度；（3）阴极积分灵敏度，是指在白光照射下，单位光通量产生的饱和光电流，单位为$\mu A \cdot lm^{-1}$，取决于光电阴极的材料，在光电阴极达到饱和发射之前，还与施加于光电阴极和第一级倍增极之间的电压有关；（4）阳极光照灵敏度，是指在白光照射下，单位光通量产生的阳极输出电，单位为$A \cdot lm^{-1}$；（5）蓝光灵敏度与红/白比，前者是用一只钨丝灯在2856K所产生的光通量，通过一个蓝光滤光器后照射到光电阴极上，单位光通量产生的饱和光电流，单位为$A \cdot lm^{-1}$（蓝光）。后者是指钨丝灯在2856K所产生的光通量，通过一个红光滤光器后照射到光电阴极上，测得的阴极光照灵敏度，与同一条件下不经过红光滤光器测得的阴极光照灵敏度之比；（6）电流增益，电流增益是指在同一总电压下，阳极输出电流与光电阴极的光电流之比；（7）阳极暗电流，阳极暗电流是指无光照在阴极上时加上高压后光电倍增管输出的微小电流。光电倍增管检测器的特点是：现已有用于全波长范围的光电倍增管，对波长很敏感，对各波长的响应效率有所不同，对紫外和可见辐射特别灵敏；响应快，响应是瞬时的；在所考虑的波长区有恒定的响应，在放大10^6倍范围内响应是线性的，响应直接正比于辐射功率；操作稳定；易于放大。光电倍增器在分析仪器信号检测中得到广泛的应用，如用作质谱仪的高灵敏度检测器。

光电池 photocell 一种光电转换的器件。将半导体沉积在铁或铜的金属基板上，半导体表面再覆盖一层金、银或其他金属的透明金属层就构成了光电池。金属基板是光电池的正极，与金属薄膜相连接的金属收集环是光电池的负极。当光照射在半导体上时，在半导体内产生自由电子和空穴，自由电子向金属薄膜流动，而空穴则移向另一极。在光的照射下，若在PN结两端接上负载电阻即有电流通过。它的数值大小既与光的强度、频率、照射面积有关，也和负载电阻值有关。当阻值为零时电流为最大，且为光强度成正比；当阻值为无限大时，端电压为最大（不超过0.6V）。一个直径为25mm的光电池在光强为$100mW \cdot cm^{-2}$的条件下，可产生100mA以上的短路电流。因此可以直接进行测量，无需外电源及放大装置。但受光照射或使用时间过长会产生疲劳现象。

光电发射 photoemission 因光电效应引起原子或分子的电子发射。一般是指物质在受到光的照射时，一定能量的光子可以和原子相互作用，把原子价轨道甚至内层轨道的电子激发出来的过程。

光电化学过程 photo-electrochemical processes 光作用下的电化学过程即分子、离子及固体等因吸收光使电子处于激发态而产生的电荷传递的过程。

光电离过程 photo-ionization process 原子或分子吸收光子的能量大于其电子电离能时，逸出电子变为离子的过程，它从中性原子电离出一个电子而不改变其余电子的量子数。原则上任何轨道上的电子均可以被电离。

光电离截面 photoelectric cross-section 射入材料的光子从给定能级产生光电子的几率，以每单位事件的面积表示。光电离截面是光子能量的函数。一般来说，在接近阈值附近具有最高的电离截面。

光电直读光谱仪 photo-electric direct reading spectrometer 一种用于快速光谱定量分析用的仪器，用光电测量方法直接测定光谱谱线强度。由于仪器中采用了光电转换元件（一般为光电倍增管）代替感光板以接收分析用的谱线强度，并转换为电信号，及时显示，因此可以提高分析速度，准确度也有提高。光电直读光谱仪有两种基本类型。一种是多道固定狭缝式（又称光量计）；另一种是单道扫描式。它是由光谱激发光源、色散系统和检测系统三部分组成。光电直读光谱仪过去在钢铁等冶炼部门应用较多，目前由于 ICP 光源的广泛使用，光电直读光谱仪才被大规模地应用。

光电子 photoelectron 在光辐照下，物体内部原子轨道上的电子获得足够的能量产生电离而逸出表面的现象，称为光电效应，逸出的电子称之为光电子。光电子的能量与入射光的能量以及电子所处的轨道有关。

光度测量误差 photometric error 光度计的标盘中，对透射率 T 的标尺刻度是均匀的。由于吸光度 A 与 T 间呈负对数关系，对 A 的标尺刻度则是不均匀的。因此，因光源波动、实验条件的偶然波动和读数误差等引起的 T 的读数波动，在测量 A 时引起的测量 A 的相对误差不是一定值，而依赖于 A（对应被测物质浓度）的大小。根据相关理论推导可知，当 $A = 0.434(T = 36.8\%)$ 时，测量相对误差最小。为获得较高的测量准确度，通常将 A 的测量范围控制在 $0.2 \sim 0.8(T = 15\% \sim 65\%)$ 之间，可通过控制溶液浓度或选择不同厚度的吸收池来实现。

光度重复性 absorbance reproducibility 分光光度计性能指标之一。指在相同条件下对某一试样进行多次重复测定时所得吸光度的重复性，以各次测定值对平均值的偏差和偏差的平均值表示性能指标的好坏。当测量信号小，仪器噪声明显增大时，光度重复性变差。

光度滴定 photometric titration 将滴定操作与吸光度测量相结合一种分析方法。将一定量的标准溶液滴定到待测溶液中，同时测定待测溶液体系在适当波长处的吸光度，通过吸光度

对滴定剂用量作图（称光度滴定曲线）来确定反应终点的方法。它不仅能应用于配位、酸碱、氧化还原反应，有时还能用于沉淀反应。其特点是终点的确定较指示剂法更为灵敏和准确，还可以用于有色溶液的滴定。

光度精度和光度重现性 photometrical accuracy and reproducibility 在光谱定量分析工作中，根据某个波长（波数）处的光强度、透射率或吸光度等光度检测值计算定量分析结果。因此光度检测值的准确性和稳定性直接影响光谱定量分析结果的可靠性。光谱仪器显示的光度检测值与试样此时的光度真实值之间的偏差程度，是衡量光度精度的依据；光谱仪器在同样检测条件下对同一试样的多次光度检测值之间的最大偏差值，则是衡量光度重现性的依据。仪器光度精度取决于仪器光、电系统工作精度（如光源、光学系统的光谱特性、光电光热探测器的响应及其线性动态范围、A/D 变换精度、电子系统增益线性度，等等）；仪器光度重现性则受到光源稳定性、杂散性、电子系统噪声、温度变化等随机因素的影响。除此以外，仪器的正确调整、工作环境条件控制、分析检测程序的正确、合理、试样的制备和控制等等，也会影响仪器分析光度精度尤其是光度重现性的高低。

光度准确性 absorbance accuracy 分光光度计性能指标之一。光度准确性是指标准样品在最大吸收波长处测得的吸光度与其真实吸光度之间的偏差。最常用于检查吸光度准确性的标准，是重铬酸钾（$K_2Cr_2O_7$）在 0.005mol · L^{-1} H_2SO_4 中的溶液。具体配制方法是：分析纯 $K_2Cr_2O_7$ 在 110℃ 干燥 1h，用 0.005mol · L^{-1} H_2SO_4 配制下列两种 $K_2Cr_2O_7$ 溶液，在室温（15～25℃），以 0.005mol · L^{-1} H_2SO_4 溶液作参比，用 1cm 吸收池测定吸光度，对照下表检查吸光度准确性。

A 溶液：(50 ± 0.5) mg · L^{-1} ($K_2Cr_2O_7$)，吸光度范围 0.2～0.7

B 溶液：(100 ± 1) mg · L^{-1} ($K_2Cr_2O_7$)，吸光度范围 0.4～1.4

测量波长 /nm	吸光度	
	溶液 A	溶液 B
235（谷）	0.626 ±0.09	1.251 ±0.019
257（峰）	0.727 ±0.007	1.454 ±0.015
313（谷）	0.244 ±0.004	0.488 ±0.007
350（峰）	0.536 ±0.005	1.071 ±0.011

光二极管阵列检测器 photo diode array detector 一种新型光电检测器。它是由硅片上形成的反相偏置的 p-n 结组成。反向偏置构成了一个耗尽层，使该结的传导性几乎降到了零。当辐射照到 n 区，就可形成空穴和电子。空穴通过耗尽层到达 p 区而湮灭，于是电导增加，增加的大小与辐射功率成正比。每平方毫米含有 15000 个以上的光二极管。每个二极管都与其邻近的二极管绝缘，它们都联结到一个共同的 n 型层上。当光二极管阵列表面被电子束扫描时，每个 p 型柱就接连着被充电到电子束的电

位，起一个充电电容器的作用。当光子打到n型表面以后形成空穴，空穴向p区移动并使沿入射辐射光路上的几个电容器放电。然后当电子束再次扫到它们时，又使这些电容器充电。这一充电电流随后被放大作为信号。光二极管阵列可以制成光学多道分析器。

光合作用 photosynthesis 在植物细胞内实现的碳水化合物（糖、淀粉和纤维素）的化学合成反应，所需能量由阳光供给。植物细胞从土壤吸收水分，从空气吸收二氧化碳通过叶绿素催化而进行合成反应。基本反应是

$$6CO_2 + 6H_2O + e \longrightarrow C_6H_{12}O_6 + 6O_2$$

反应不仅形成可食用的物质，而且放出氧气，因此光合作用对人类极其重要。事实上空气中全部氧都是来自光合作用，且半数以上是由藻类及其他水生植物提供的，故植物生存是变辐射能为化学能的主要途径。由无机成分合成有机化合物是植物独有的能力，为其他生物所不具备；无阳光时，植物吸收氧放出二氧化碳。光合作用是可逆反应，所得的有机物燃烧生成二氧化碳和水，同时放出原吸收的能量。

光化学烟雾 photochemical smog 汽车、工厂等污染源排入大气的碳氢化合物和氮氧化物等一次污染物在阳光作用下会发生光学反应生成二次污染物。参与光学反应过程的一次污染物和二次污染物的混合物所形成的烟雾污染现象，称为光化学烟雾。光化学烟雾对人和动、植物有严重危害。光化学污染的表现特征是烟雾弥漫，大气能见度低。光化学烟雾一般发生在大气湿度较低，气温为24～32℃的夏季晴天，污染高峰出现在中午或稍后。光化学烟雾是一种循环过程，白天生成，傍晚消失。污染区大气的实测表明，一次污染物HC及一氧化氮（NO）的最大值出现在早晨交通繁忙时刻，随着NO浓度的下降，NO_2浓度增大。O_3和醛类第二次污染物随着阳光增强和NO_2、HC浓度降低而积聚起来。它们的峰值一般比NO峰值的出现延迟约4～5h。二次污染物过氧乙酰硝酸酯（PAN）浓度随时间的变化同O_3和醛类相似。

光极 phototrode 光导纤维传感器称为光极。它的基本原理是使光通过光纤传至另一端，位于端点附近的待测物质或与待测物质起相互作用的固定试剂相，通过吸收、反射或发光等使光性质或光强发生变化，而实现定量分析的目的。

光检测磁共振 optically detected magnetic resonance; ODMR 抗磁体系在光激发下所产生的瞬态顺磁体系，可以是三重态分子，也可以是自由基。光检测磁共振就是研究这种激发三重态的方法，其特点是利用发光特性，当微波频率扫过共振点时，由于布居数的重新分配，发光强度（如磷光、荧光、三重态-三重态吸收）将发生变化，通过检测发光强度的变化代替直接检测ESR信号以提高灵敏度。因为在零磁场下ODMR

的灵敏度和分辨率比在高磁场下的ODMR高10~100倍，所以ODMR的检测多在零磁场下进行。

光检测电子-电子双共振 optically detected electron-electron spin double resonance; ODELDOR 类似于光检测磁共振（ODMR），用检测发光强度的变化代替直接检测电子－电子双共振（ELDOR）信号。发光实际上是电子从一个能级跃迁至另一个能级，如果这两个能级具有相同的衰减速度常数，这时就观测不到ODMR，然而ODELDOR却成为有效的研究手段。参见**光检测磁共振**条和**电子-电子双共振**条。

光检测电子-核-核三重共振 optically detected electron-nuclear-nuclear triple resonance; ODTRIPLE; ODEN2TR 一种光检测多重共振，类似于光检测磁共振（ODMR），用检测发光强度的变化代替直接检测电子-核-核三重共振（TRIPLE）信号。与通常的TRIPLE一样，ODTRIPLE在对来自不同顺磁性物种的光检测电子-核双共振（ODENDOR）跃迁的分离、识别，涉及跃迁的m_s归属及等价核的识别等方面具有非常显著的优点。参见**光检测磁共振**条和**电子-核-核三重共振**条。

光检测电子-核双共振 optically detected electron-nuclear double resonance; ODENDOR 一种光检测多重共振，类似于光检测磁共振（ODMR），用检测发光强度的变化代替直接检测电子－核双共振（ENDOR）信号，一般为^{1}H、^{13}C和^{14}N核的ODENDOR，主要应用于确定激发三重态芳香族分子的自旋密度分布及分子结构的信息。与ODMR不同，在高磁场下的ODENDOR可以克服零磁场下的ODENDOR的不足之处，具有更大的优点。参看**光检测磁共振**条和**电子-核双共振**条。

光阑 diaphragm 组成光学系统的透镜、平面镜和棱镜等光学元件都有一定的孔径，用以限制可以成像的光束的截面；某些光学系统还特别附加了一定形状的开孔的屏，用以限制成像光束的截面。所有这些光学元件的边框和特别附加的有一定形状的开孔的屏统称为光阑，它在光学系统中起到拦光的作用。光阑因其在实际光学系统中的位置不同而产生不同的性质，可分为孔径光阑和视场光阑。孔径光阑起着控制进入光学系统的光能量多少、像差的大小以及成像物的空间深度等作用，故有时也被称为有效光阑。视场光阑的大小不能影响成像光束的截面，但能直接限制物体空间被成像的范围。

光离子化检测器 photo-ionization detector; PID 利用紫外光能激发解离电位较低（小于10.2eV）的化合物，使之电离，在电场作用下形成电流而进行检测的一种检测器。多用于芳香族化合物如多环芳烃的分析，对H_2S、PH_3、N_2H_4等物质也有很高的灵敏度。不同能量的光源对各种化合物的灵敏度和选择性有影响。

光量计 quantometer 是原子发射

光谱仪的一种，又名多通道光电光谱仪。它被广泛应用于分析固体金属试样，由于它曾使用光子计数器来测量发光强度，因而也称光量计。光量计由光源、凹面光栅分光器及光电测量装置及数据处理和控制装置四部分构成。在光量计中，一个出射狭缝和一个光电倍增管构成一个通道，可接收一条谱线，多道仪器是安装多个通道（可达70个）。

光密度计 densitometer 是一种用于纸色谱、薄层色谱、电泳等方法中进行组分斑点定性、定量的仪器。由光源、单色器、样品台、检测器、记录器等部件组成。测量时将经展开、显色或不显色后的谱图放在样品台上，经单色光照射，组分斑点对光（紫外或可见光）有吸收，经检测、记录得到色谱图，每一组分的斑点呈一个色谱峰。根据峰的位置和峰面积的大小对组分进行定性、定量分析。

光敏二极管 photo diode; phototube 又称光电管。由封在玻璃壳内的光发射阴极和阳极收集器所构成。其阴极为一金属半圆筒，内表面涂有碱金属及其他材料组成的光敏物质，阳极为金属镍环或镍片。在光的作用下，光敏物质发射光电子，这些光电子被加在两极间的电压（约90V）所加速，并为阳极所收集而产生光电流，这一电流在负载电阻两端产生一个电位降，再经直流放大器放大，并进行测量。光敏二极管的光谱响应特性决定于光阴极上的涂层材料。不同阴极材料制成的光敏二极管有着不同的光谱使用范围。即使同一光敏二极管，对不同波长的光，其灵敏度也不同。因此对不同光谱区的辐射，应选用不同类型的光敏二极管进行检测。

光谱 optical spectrum 电磁波谱中光学波段的辐射，通过适当的方式形成按波长、波数或频率值顺序的空间分离序列，称为光谱。光谱的波长范围一般认为从10nm～1mm，包含了从真空紫外经可见区到远红外区的整个光学波段。光谱的产生是由于物质原子中的电子能级跃迁、分子中的电子能级跃迁及分子振动能级、分子转动能级的变化而形成的光辐射或光吸收作用结果。在光谱学中，按光辐射能量传递的方式不同可分成发射光谱、吸收光谱、荧光光谱和拉曼光谱等；在光谱表现形态上，则有线状光谱、带状光谱和连续光谱。

光谱半定量分析 semiquantitative spectral analysis 半定量分析主要是根据定量分析的原理和元素的特征谱线的强度比，判断试样中元素的大致含量。其测定准确度虽然比定量分析低些，但分析的速度快，成本低，可以在较短的时间内得到多种杂质元素的分析结果。这种方法用于化学分析中的方法选定，并在冶金生产中的金属合金牌号的分类、配料等分析中起着很大的作用。常采用摄谱法和看谱法进行光谱半定量分析。进行这类分析，要求试验者有一定的经验，熟悉各种激发条件下（各类光源）、不同元素、不同含量的特征谱线强度（和内标线的强度关系），如经验不

足，或判断困难，可以将已知含量的标准与试样同时摄谱，比较后判断。

光谱比长仪 spectral comparator 测定波长的仪器。测量精度可达万分之一毫米。光谱比长仪是根据阿贝原理设计的，在光谱分析工作中用来测定某些未知谱线的波长或已知波长的谱线在感光板上的线距离。

光谱标样 standard sample for spectrochemical analysis 专门用于光谱分析的一种标准样品。标样与试样的基体组成相同或相近，所含分析组分的量已被准确定值，具有良好的均匀性和稳定性。用于校准测量仪器、评价分析方法和制作标准曲线等。

光谱差减法 spectral subtraction method 光谱差减是用计算机光谱差减软件进行的一种操作。只是对两个光谱进行数学处理，操作方便，获得谱图质量也好。计算机差减可将混合物中一个或若干个干扰组分从混合物中除去，对光程长度无严格要求。它的原理是利用混合物光谱（以吸光度表示）A_m 和另一纯干扰组分的吸收光谱 A_t 的 k 倍之间的差额，得到差谱 A_D 即从混合物光谱中差减掉了干扰组分的光谱。若 A_m 为双组分混合物，差谱即为纯的另一个组分的光谱。光谱差减不仅可消除干扰组分的谱带干扰，还可用于样品的鉴定、质量控制、移走不纯物质（溶剂、杂质等），还可对物质分子变化进行鉴定。

光谱重叠 spectral overlap 当两条谱线的波长差（$\Delta\lambda_1$）小于光谱仪器的实际分辨率 R 的相应值 $\Delta\lambda=\lambda/R$ 时，称为光谱线重叠。式中，λ 是两谱线的平均波长。

光谱纯 specpure 光谱纯的试剂、化合物或金属一般是指该试剂、化合物或金属在用光谱方法分析时在光谱中不出现或很少出现杂质元素的谱线。不同的光谱纯试剂、化合物或金属所含杂质的多少也有所不同。

光谱灯 spectroscopic lamps 光谱灯是用于光谱学研究或光谱分析工作、能够在确定的波长范围内辐射出特定线状光谱或连续光谱光能量的特种光源。例如灯内充注各种特定元素、适当金属蒸气的种种光谱灯，如汞灯、钠灯、氢灯、氘灯、元素空心阴极灯等等。光谱灯在光谱激发、吸收测定、背景校正、波长定标等方面得到广泛的应用。

光谱电化学法 spectroelectrochemistry 把光谱技术和电化学方法结合起来，在一个电解池内同时进行测量的一种方法。通常，以电化学为激发信号，而体系对电激发信号的响应则以光谱技术进行监测，两者密切结合发挥了各自的优点。对于在分子水平上研究电极过程机理，电极表面特性，鉴定参与反应的中间体，瞬间状态和产物性质，测量式电极电势和电子转移数，电极反应速率常数以及扩散系数等等，提供了十分有力的研究手段。

光谱定量分析 quantitative spectral analysis 试样光谱中某元素谱线的强度与该元素在试样中的含量有关，

因此通过对该元素谱线强度的测定，即可确定该元素在试样中的含量，此即光谱定量分析。其核心问题是用实验方法建立谱线强度与分析物浓度的单值关系。为了提高分析的准确度，通常采用内标法，用分析线与内标线的强度比对分析物浓度建立校正曲线。根据对浓度的测定方法，光谱定量分析可以分为校准曲线法、标准加入法等。

光谱定性分析 qualitative spectral analysis 不同元素的原子（或离子）被激发后可以辐射出波长一定的特征光谱，根据试样光谱中有无某元素原子（或离子）的特征光谱，可以判断试样中有无该元素。光谱定性分析过去多采用摄谱法。摄谱法操作简便，价格便宜，能同时获得多元素的光谱。目前亦采用 ICP 光源的直读发射光谱法进行定性分析。

光谱分辨率 spectral resolution 直接表征刚能被光谱仪器分辨开的两条波长差为 $\Delta\lambda$ 的谱线能力的指标，其定义为 $R=\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$，$\lambda$ 为这两条谱线波长的平均值。分辨率 R 是个纯数值，没有单位。按照定义计算所得的光谱分辨率值称为理论分辨率。所谓“刚能被分辨开”的判定依据是瑞利（Rayleigh）判则：一条谱线之衍射花样的中央极大值正好与相邻等强度谱线衍射花样的第一极小值重合时（这时合成衍射花样两个极大值之间有 20% 左右的凹陷），认为这两条谱线刚刚能被分辨开，若两条谱线再靠近则中间凹陷变得更浅平，两条谱线便不能分辨而弥合在一起了。实际光谱仪器中，除了衍射效应以外还存在诸如光学系统像差、探测器响应、机械和电子系统响应、仪器调整、照明状况等一系列影响因素，能实际达到的分辨率（称为实际光谱分辨率）明显地小于理论分辨率；只有设计、制造水平高、正确调整使用的光谱仪器才能获得尽可能接近理论值的高分辨状态。

光谱分析检出限 detection limit of spectral analysis 一个元素的检出限是利用一个指定分析方法在一定可信度下能可靠测定指定化学元素的最小量或浓度。

光谱分析精密度 precision of spectral analysis 用光谱分析法重复测量所得结果之间相互接近的程度。目前常用标准偏差或相对标准偏差来描述精密度。

光谱分析灵敏度 sensitivity of spectral analysis 试样中被分析元素的单位含量改变所引起的测定信号（响应值）的改变。灵敏度高，则工作曲线有较高的斜率。

光谱干扰 spectral interference 背景辐射和光谱重叠引起的干扰。前者来自连续辐射、杂散光、光源气体辐射分子谱带等。后者来自多谱线元素的谱线没有或没有完全被分辨开、谱线轮廓的展宽等。减少和消除干扰的方法有：采用与试样基体相匹配标样制作校正曲线；使用光谱化学性质与分析元素相近的内标元素和内标线，

用内标法定量；使用更大色散率和分辨率的仪器；优化测定条件；用化学计量学方法进行校正等。

光谱缓冲剂 spectroscopic buffer 在光谱分析中，加入到试样中以减小或消除基体干扰的物质。在原子吸收光谱分析中，加入大量缓冲剂，使干扰影响达到"饱和"，不再随干扰组分含量而变化。在原子发射光谱分析中，用它来控制电极和电弧等离子体温度、等离子体中的电子密度和元素的电离度，以及分析物的蒸发行为等。但是大量缓冲剂的存在会降低测定灵敏度。

光谱计算板 spectral calculating board 早期进行光谱定量分析时，需要将测得的谱线黑度换算成强度，有时需扣除落在谱线上的背景的强度，从而求得分析结果。光谱计算板就是用于上述计算的工具，它可以简化运算，提高分析速度。

光谱解析法 spectroscopic analysis method 根据红外光谱的特征解析化合物。红外谱带特征有红外谱带的位置、形状和相对强度。谱带位置是指示某一基团存在的最有用的特征。从谱带的形状也能得到有关基团的一些信息，如氢键和离子的官能团可以产生很宽的红外谱带，这对于鉴定特殊基团的存在很有用。酰胺基团的 ν（C═O）和烯类的 ν（C═C）均在 $1650cm^{-1}$ 附近产生吸收。但酰胺基团的羰基大都形成氢键，其谱带较宽，很容易和烯类的谱带区别。将光谱中一条谱带的强度和另一条谱带相比，可以得出一个定量的概念，同时也可以指示某特殊基团或元素的存在。如 C—H 基团邻接氯原子时，将使它的摇摆、扭绞和变形振动的谱带由弱变强，因此从其对应谱带的增强可以判断氯原子的存在。

光谱空白背景 spectral blank background 由不含被测元素的空白试样所测得的光谱背景信号。它有不同的含义，对被测元素而言，光谱空白背景即光谱空白信号；对空白试样而言，它是指由空白试样所获得的全部光谱。

光谱空白信号 spectral blank signal 由不含被测元素的空白试样所测得的光谱信号。它的来源有分子连续光谱、光散射和干扰谱线等。空白信号不同于空白噪声，前者是固定信号，影响被测元素实际可测定的下限；后者是随机信号，影响被测元素的最低检出限。

光谱通带 spectral bandpass 分光器从给定光源辐射中分离出的在某标称波长或频率处的辐射范围。光谱通带直接影响测定灵敏度和工作曲线的线性范围。分光器光谱通带由单色器的线色散率与狭缝宽度决定，对于给定的仪器，线散射率是固定的，它由狭缝宽度决定。分析谱线复杂的元素，或背景比较强时，要求使用较窄的光谱通带。最合适的光谱通带需通过实验确定。

光谱投影仪 spectral projector 又称映谱仪。将谱片上光谱放大、并投影到屏幕上，便于在比较大的波长范

围和较大的视场范围内观察和评定样品光谱的设备。

光谱线系 spectral line series 在原子光谱中，常用 $n^{2S+1}L_J$ 来表示原子所处的能级，此符号称为光谱项。符号 L 左上角的 $2S+1$ 称为光谱项的多重性。当 $L>S$ 时，由 L 和 S 所确定的每一个光谱项，将有 $2S+1$ 个具有不同 J 值的光谱支项。由于 J 值不同的支项，其能量差别极小，因而由它们产生的诸光谱线，波长极相近，称光谱线系。它们在排列的顺序上，或是在强度分布上表现一定的规律性。

光谱选律 spectral selectivity 红外和拉曼光谱同属于分子光谱，但同一分子的红外和拉曼光谱不尽相同。对于分子的某一基频振动谱带，是在红外光谱中出现，还是在拉曼光谱中出现，是由光谱选律决定的。光谱选律是对某一简正振动的红外或拉曼光谱活性的判据：如果某一简正振动时对应于分子的偶极矩变化不为零，则是红外活性的，反之，其偶极矩变化为零，是红外非活性的；如果某一简正振动对应分子的感生极化率变化不为零，则是拉曼活性的，反之，其感生极化率变化等于零，则是拉曼非活性的。

光谱仪器 spectral instruments 用于获得、记录、分析光学光谱的科学仪器。光谱仪器的工作波段范围从真空紫外开始经可见光区直到远红外区，光谱仪器的工作对象为发射光谱、吸收光谱、荧光光谱、散射光谱等，光谱仪器的工作原理基于光的发射、吸收及光反射、折射、偏振、衍射、干涉等光学效应以及光学信息调制技术等。典型的光谱仪器包括以下各部分：光入射系统、光色散、衍射或调制系统、光电或热电探测系统、电子学系统、显示或记录系统、控制或数据处理计算机系统等，现代光谱仪器是现代光学、精密机械、微电子、计算机硬件和软件技术的知识密集高科技系统。

光谱载体 spectroscopic carrier 在用粉末电弧作分析时，往往在样品中特意加入一些称为光谱载体的化合物，以提高欲分析元素的测定灵敏度。载体的作用大致可归纳为下列几个方面：（1）加强分馏效应，使易挥发（或中等挥发度）的杂质元素与难挥发的基体元素在不同的时间进入蒸气云；（2）增加分析元素进入蒸气云的速度，这在用一些卤素化合物为载体时表现较为明显；（3）建立对于分析元素激发较为合适的弧温；（4）改变元素在蒸气云中的空间分布，延长原子在蒸气云中的停留时间。光谱载体是降低检测限的有效方法，被广泛地使用。经常采用的载体有 $AgCl$、NaF、$NaCl$、Ga_2O_3 等。

光强度 light intensity 这是一个不太严密（在光度学中只有描述点光源发光强度的概念），但却在分析工作中经常使用的术语。通常所说的光强度用来描述光束中所携带的光能量大小（严格说应是单位立体角中光束发送的光通量多少）。在实际工

作中可以将光强度理解为均匀光束中单位面积所包容的光能量多少，因为实际分析测试工作针对的是光与物质的相互作用，光强度较大就有较多的光能量、光与物质的相互作用较大、分析检测信息就较大。

光散射 light scattering 光散射是自然界常见的现象。当一束光照射到介质时，大部分光被介质反射或透过介质，另一部分的光则向四面八方射去，这就是光散射。散射光频率与入射光的频率相同的称瑞利散射，散射光频率与入射光频率不同的称拉曼散射。

光散射检测器 light scattering detector 利用物质微粒（包括分子）对光的散射作用进行分析的检测器。当某一波长的光照射在物质微粒上时，除一部分通过物质微粒或被微粒吸收外，大部分的光将以同样的波长向各个方向散射（瑞利散射），散射光的强度是微粒数量和微粒大小的函数。光散射检测器是凝胶色谱中常用的检测器之一。

光栅的光谱特性 spectral specificity of grating 在光谱仪器中采用衍射光栅作为色散元件获取的光谱，称为光栅光谱。光栅的光谱特性可由光栅方程推出：光栅的角色散率可直接由光栅方程的微分得到

$$\frac{d\beta}{d\lambda}=\frac{m}{d\cos\beta}$$

可见光栅的角色散率与光栅工作级次 m 成正比，所以使用二级光谱时角色散率为使用一级光谱时的 2 倍；角色散率与光栅常数 d（相邻两条栅线之间距）成反比，因此尺寸相同的每毫米 1200 线的光栅将具有 2 倍于使用每毫米 600 线的光栅所能得的角色散率；角色散率还与 $\cos\beta$ 成反比，说明在较大衍射角下工作也能获得较大的角色散率。经过推导，还可得出光栅的光谱分辨率：

$$R=\frac{\lambda}{\Delta\lambda}=mN$$

式中，N 为光栅工作面上的栅线总数，因此采用高级次（$m>1$），大光栅（d 一定时光栅越大则 N 数越大）可获得高分辨率。在实际仪器设计制造和应用时，上述各种参数的增大或减小都受到技术、工艺、经济各方面的限制，不能随心所欲没有限度地追求高性能。

光栅方程 grating equation 光在光栅上衍射时衍射光线的方向可由单缝衍射和多缝干涉理论推导出。

$$d(\sin\alpha\pm\sin\beta)=m\lambda$$
$$(m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

这就是光栅方程。式中，d 为光栅常数，即相邻两条栅线之间距（如一块每毫米 600 线的光栅，其光栅常数为 $d=1/600\text{mm}$），α 和 β 分别为入射角和衍射角，m 称为光栅的光谱级次。由光栅方程可看出：当 m 一定（如 $m=1$）时，不同波长的入射光以同样角度 α 入射，则被光栅衍射后射出的各种波长将以不同的方向（不同 β 角）分散射出，这说明光栅可将混在一起的复色光按波长顺序在空间分离开，这就是衍射光栅的色散

机理。当 $m=0$ 时，有 $\alpha=\pm\beta$，说明此时光栅没有色散作用（$\alpha=-\beta$ 时光栅相当于一块平面反射镜），即使这样常常还称 $m=0$ 时为光栅的“零级光谱”。$m=\pm1$ 时，各波长光顺序排列形成正、负一级光谱（排列顺序相反），$m=\pm2$，±3，…时分别称为正、负二级、三级光谱，在实用中因高级次光谱能量弱还有其他一系列问题，尽管角色散率高也很少使用。

光栅光谱仪 grating spectrograph 用光栅作为色散元件的摄谱仪就是光栅光谱仪。常用的光栅有平面光栅和凹面光栅，相应的摄谱仪叫平面光栅光谱仪和凹面光栅光谱仪。和棱镜光谱仪比较，光栅光谱仪具有以下优点：（1）分辨率高；（2）按一定设计的光学系统可以使线色散率近似地为常数，不随波长而变化；（3）利用仪器不同光谱级次的光谱工作，得到不同的分辨率和线色散率；（4）可以利用具有一定闪耀角的光栅，将光谱能量集中辐射在某一光谱区域。但光栅光谱仪也有缺点，例如光谱级次的重叠可能引起谱线干扰，使用时要注意分离。光栅光谱仪由于具有一系列优越性，和制造光栅不像制造棱镜一样受到原料的限制，随着光栅刻制技术的不断改进和发展，近年来，和棱镜光谱仪比较，它得到更加广泛的应用。

光栅红外分光计 grating infrared spectrometer 以衍射光栅作为色散元件的红外分光计。它的优点是分辨本领大（面积相同时，光栅的角色散至少为 60° 顶角的 NaCl 棱镜的 3 倍）；分光计波长校正与温度无关；在最佳条件下，光栅的光通量比棱镜大。参见**衍射光栅**条。

光栅效率 grating efficiency 入射到光栅的光波能量集中到闪耀光谱区的百分数。

光声池 optoacoustic cells 进行光声光谱法测定时放置样品的密封样品池。光声池上有一个可通过红外辐射的光学窗口，池内充满不吸收红外光的气体。气体压力变化产生声音，经微音器检测产生电信号，经前置放大器放大后输入傅里叶变换红外光谱仪的主放大器及信号处理系统，再经傅里叶变换将干涉信号转变成吸收光谱图。参见**傅里叶变换红外光声光谱**条。

光声光谱法 photocaustic spectrometry 利用光声效应获得的光声光谱进行分析测试的方法。通常采用可调谐激光作光源，故又称激光诱导光声光谱法（laser induced photocaustic spectrometry）。激光光源强度大，测量灵敏度高。该法不仅可用于气态、液态和固态物质的定性定量或结构分析以及物质变化过程中组分变化的瞬时分析，而且可用于研究气体离解，振动跃迁弛豫速率，无辐射跃迁等瞬时过程。激光光声探测技术还可用作其他分析仪器，如气相色谱的检测器而实现两种分析技术的联用。

光声光谱仪 photoacoustic spectrometer 利用光声效应，将经调制

的单色光照射到密封在光声池中的试样上，试样吸收光能量受到激发，当试样分子从激发态无辐射地弛豫返回基态时，多余的能量变成热能从而引起密封光声池中的压力变化，以灵敏微音器可接受压力波动所致的声信号，就可获得与试样特性有关的分析信息，这就是光声光谱仪的工作原理。光声光谱仪可以对各种试样的成分、结构进行分析，尤其对常规光谱仪难以分析的深色或不透明的试样以及生物活体试样的分析特别有用。

光声检测法 photoacoustic detection 利用光声效果的液相色谱检测方法。它以连续激光或脉冲激光作光源，当激光照射在样品上，样品吸收光能，在密封的光声池内，将一部分光能通过非辐射跃迁转变成热能，使样品温度升高，通过激光调制使样品温度以一定的频率升降，从而产生声波（热波），微音器接收声波并将其转变成电信号。光声检测法的灵敏度比通常的紫外检测高约一个数量级，是一种新型的高灵敏度液相色谱检测法。

光声拉曼光谱 photoacoustic spectroscopy 物质受到受激拉曼激发后产生的拉曼散射，转换为声信号，用光声光谱技术检测而获得的拉曼光谱，即为光声拉曼光谱。

光声探测器 optoacoustic detector 光声探测器与 FTIR 光谱仪配接时，是放在光学台内样品室中，取代原来的样品架。光声探测器性能的好坏在傅里叶变换红外光声光谱测量中起着决定性的作用。目前有两种常见的光声检测器。一是吉林大学制造的 JDV 系列光声探测器；二是美国 MTEC 光声公司制造的 MTEC 系列光声探测器。JDV 光声探测器性能好（灵敏度、防震、抗噪声干扰等）、体积小，使用仪器电源，可放在 FTIR 仪器中，也可配接在真空型 FTIR 仪器上在真空光学台内工作。MTEC 光声探测器性能好，灵敏度也比较高，它带有一个电源和放大器，体积较大，不能全部放在 FTIR 仪器上。

光束 light beam 在光学中常把光简化成光能量传播方向的几何直线，以一定规律合在一起的许多光线称之为光束。光束中的各条光线可以有相同的传播方向（称之为平行光束），也有相交于一点的情况（会聚光束或发散光束）。从不同出发点、杂散无序向四面八方行进的许多光线，不能形成光束。

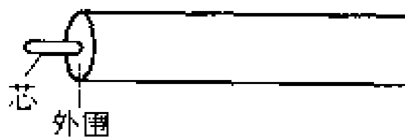
光束聚焦附件 light beam focalizing accessories 见**红外光束聚焦器**条。

光通量 luminous flux 光是人眼可以感受的电磁辐射，所以光通量是人眼可以感受到的辐射通量（参见**辐射通量**条），即光通量等于辐射通量与人眼视见函数的乘积，表征辐射源对人眼引起的视觉强度。视见函数是人眼对各种波长辐射的相对灵敏度变化关系（包括在充分照明条件下的明视见函数和照明微弱时的暗视见函数，两者不一致，表明人眼在明、暗条件下灵敏度变化状态不同）。

光透电极 optically transparent electrode; OTE 光谱电化学中通常使用的电极，由导电材料，如 SnO_2，In_2O_3，Au、Pt 等，涂或镀一薄膜于透明体（玻璃或石英）上而制成的，或是由金属丝编制网状而成。透光性好。

光微扰-电子顺磁共振 optical perturbation-electron paramagnetic resonance 光微扰-电子顺磁共振与光检测磁共振不同，是直接记录受光激发的溶液中产生的三重态或自由基的 ESR 瞬态信号的一种方法，相当于时间分辨电子顺磁共振。这种实验采用周期性调制的激发光：一种是单个光脉冲（可用脉冲式激光）；另一种是连续波。多用于分析顺磁样品的动力学问题。

光纤 optical fiber 一种用于传送可见光或近红外光的导体，为光导波路。光纤形状如下图，具有圆形横截面，中心部的折射率比周围要大，设计成可将光封闭在光纤中心的式样。有中心部直径为数微米的单一模式的光纤和数十微米的多模式光纤，其主要成分为石英。有折射率阶段性变化和按一定比例逐渐变化两种形式。有的光纤传送损失可降至 $1db \cdot km^{-1}$ 以下。光纤主要用于光通信、激光测量的传送线路，也用作温度、压力、音波等的传感器。



光纤传感器 optical fiber sensor 又称光纤化学传感器，如光纤荧光传感器等。采用光导纤维传感，光纤会合处末端用传感膜盖住，光照在传感膜上，光信号的变化通过光导纤维传给检测器。如利用氧对染料的荧光猝灭作用制作的相位移法光纤氧传感器，其传感膜由染料、聚硅酮、硅藻土等涂在玻片上而成。若将固相免疫测定的原理用于光纤传感器上可以制作光纤免疫传感器。如通过有机硅烷化试剂将抗体或抗原直接粘附在光纤末端以构成一种稳定且具有选择性的光纤免疫传感器等。光纤传感器已经得到日益广泛的应用，是一种简单、快速和现场分析的重要方法。

光纤共振拉曼光谱 optical fiber resonance Raman spectroscopy 是用光导纤维作为探头测得光谱信号而获得的共振拉曼光谱。通常适用于环境、化学或生物体系中，所测的样品一般是液体。

光学多道分析仪 optical multichannel analyzer; OMA 一种采用多道方法快速检测微弱光谱信号的电子光学系统，采用计算机可作实时自动信息处理和数据存储，能输出光谱数据和光谱图。目前，已广泛采用增强光电二极管阵列器件（增强型 CCD）作为 OMA 的检测器。

光学多通道分析仪 optical multichannel analyzer 采用多通道方法快速检测微弱光谱信号的电子光学系统，主要由光学单色仪、光学多通道检测器、信号控制和数据处理等部分

组成。它取代了传统光谱测量中的感光板，将感光时间缩短到纳秒级，同时也大大提高了系统的灵敏度。

光学混频 light mixing 几种单色相干光在非线性介质内发生耦合作用，并同时发射出另外一种频率相干光的现象。发生耦合相互作用的非线性极化率，按其阶次，可分为三波混频、四波混频和多波混频。在电偶极矩近似下，三波混频只能发生在没有中心对称的各向异性光学晶体，而在各类光学介质（包括有中心对称的和各向同性的介质）中都可以发生四波混频过程。

光诱导电子转移 photoinduced electron transfer; PET 有分子内以及超分子内电子转移两种情况。当一个分子由具有分子结合位点的受体部分以及发光基团通过适当的连接臂结合形成时，若该分子中发光基团的激发态能量足以氧化其受体部分，则当分子受光激发后，受体部分的最高占有轨道（HOMO）上的电子会向发光基团的 HOMO 轨道转移，从而阻止了发光基团的荧光发射过程，即产生荧光的光诱导电子转移猝灭。该分子结合客体后，受体部分氧化电位升高，光诱导电子转移过程热力学上不再占优势，结果是恢复了发光基团本身的荧光，即实现了光的“关-开”过程。在由分子给体与分子受体组成的超分子体系中，同样会发生光诱导电子转移。该原理已广泛应用于分子识别的受体分子设计中。

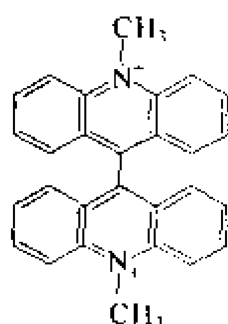
光与物质相互作用 interaction between light and substance 光投射到物质上时，会出现透射、反射、折射、散射、偏振、光发射、光吸收等等一系列现象。这些现象的实质是光与物质原子、分子间的相互作用结果，是直接与光的波长、强度、投射方式及物质本身的宏观微观特性相关的。例如物质受到光照时，光能量会引起物质原子或分子的能级跃迁，进而表现出光的吸收或激发发光。不同波长、不同物质相互作用的结果各不相同，从而可直接利用光与物质的相互作用，直接或间接地分析检测物质，光谱分析及其他种种光学分析的实质就是如此。

光源 light source 能辐射出光能量的物体。温度高于热力学温度零度的任何物体都会发出热辐射或光辐射。在分析领域所指的光源是能辐射出从真空紫外到远红外波段范围内不可见或可见光辐射的物体。常用的光源有热光源（红外线灯、白炽灯等）、气体放电灯、激光、半导体发光二极管、等等。在不同的分析检测工作中，需应用不同的光源，它们基于不同的物理、化学机理发光，具有不同的辐射光谱组成和不同的强度、结构形式，机电构造也各不相同。

光泽度 glossiness 物体表面具有完善镜面反射性能的程度。任何表面的光泽度与其表面微观粗糙度直接相关，越粗糙光泽度越低。表面光泽随入射光偏离表面法线的角度而变化，偏离角增加光泽增加。光泽度的测量通常以固定的入射角进行检测，如在

镜反射方向的峰值越高、裂化曲线越细窄，光泽度就越高。

光泽精 Lucigenin 光泽精是一绿色荧光物质，最大发射波长约在500nm。碱性条件下可被过氧化氢氧化产生强烈化学发光，主要发光体是N-甲基吖啶酮发射波长约为442nm（乙醇介质）。利用某些金属离子可以催化过氧化氢氧化光泽精产生强烈化学发光的性质，可灵敏检测这些金属离子。此外，临床上一些重要的还原剂如抗坏血酸、尿酸、葡萄糖等与光泽精反应亦可产生化学发光。



光致变色 photochromism 固体或溶液状态的物质在紫外或短波长可见光的照射下颜色改变，置于暗处颜色复原（一般复原的速度较慢）的现象。变色的原因有质子转移引起的光致异构、解离导致的游离基生成、环的开裂等，但一般变色机理不十分清楚。某些无机物如$Hg_3S_2I_2$、ZnS等具有光致变色的特性，腙、脎、俘精酸酐、二苯乙烯、水杨醛、螺吡喃、双咪唑等的衍生物以及双蒽酮等有机物是有名的光致变色物质。这些有机物多从无色或淡黄色向蓝色、紫色、红紫色转变，色彩变化明显。有些光致变色物质的固体或溶液还具有热变色、压力变色等特性。

光致电离 photo ionization；PI 亦称光诱导电离（photo-induced ionization）。是用光照射样品分子，使样品分子吸收能量而实现离子化的方法。在各种光源中，由于激光具有高能、单色、易于调制、可聚焦成激光微束等特点。当使用激光为离子化光源时，称为激光电离（laser *ionization*，LI）或激光解吸电离（laser desorption ionization ，LDI）。利用聚焦的激光束照射样品表面，形成局部高温等离子体，检测等离子体中的正、负离子，可以进行表面和深度分析，此称激光探针（laser probe ，LP）。

光致发光 photoluminescence 分子或离子等吸收紫外或可见光后，再以紫外或可见光的形式发射能量的现象。一般指荧光及磷光现象。发光强度随激发波长变化的光谱称为激发光谱，随发射波长变化的光谱称为发射光谱。激发光谱与发射光谱间符合斯托克斯规则。光致发光可用于研究物质的电子状态，发光物质的痕量分析，发光体的分子取向，发光过程的动力学等。采用发光探针，可以大大扩展光致发光的应用范围，在生物医学、环境科学等领域有广阔的应用前景。

光致异构 photoisomerization 通过光化学反应引起的异构现象。分为发生光致异构的分子本身吸光以及其他分子吸光后将能量传递给发生光致异构的分子即增敏异构两种情况。比如烯烃在光照下发生的顺反异构互变现象是最为人们熟知的

例子。动物视觉最初的过程就是光照下多烯分子顺反异构变化的结果。此外，光照还可以导致氢氧原子的移动、开环闭环或经历这些过程分子内发生了重组等。

光轴 optical axis 由两个曲面围成的透镜，其前后两面曲率中心（例如球面的球心）的连线，称为透镜的光轴。由多块透镜组成的复杂光学系统，所有各透镜曲面的曲率中心都应在同一根直线上（共轴系统）。在光学分析仪器的光学系统中，还有反射镜、棱镜、光栅等使光线传播方向突变的光学元件，整个系统的光轴不再是一根直线而由几段方位不同的直线连接、形成折线，在这种非共轴系统中应分段考虑光传递问题。

光子活化分析 photon activation analysis 以 γ 光子为辐照源将样品中稳定核转换为放射性核素的活化分析方法。1954 年巴塞利（R. Basile）首先将电子回旋加速器用于光子活化分析，测定有机化合物中的氧。（γ，n）是根据光核反应进行活化分析的主要反应，对原子序数小的轻元素，（γ，p）反应也是同等重要的。该法除具有无试剂空白、不破坏样品、准确度好等活化分析的共同特点之外，还有其自身的特点，如能测定中子活化分析不能测定的元素 C、Be、Cd、Pb 等，测定 N、O、F 和某些中等质量或重元素如 Fe、Ni、Cr、Ti、Nb、Mo、Zr、Tl 等能获得比中子活化分析更高的灵敏度，对于高含钠量的生物样品，不存在热中子活化分析中所产生的^{24}Na 引起的强烈放射性的影响。γ 光子的穿透能力比带电粒子强，可使用大体积样品以获得更具代表性的分析结果和提高灵敏度，干扰比带电粒子活化分析少。该法的缺点是，γ 光子引起的核反应比中子活化分析复杂，测定大多数元素的灵敏度比中子活化分析低 1～2 个数量级，设备复杂和价格昂贵。参见**活化分析**条。

光子相关光谱 photon correlation spectroscopy 一种用于测量溶液等动态行为的特殊技术。如果按检测频率位移来划分，则把检测频移范围在 1～10^{6} Hz的动态弹性光散射称为光子相关光谱技术。

广角激光散射光度计 wide angle laser scattering photometer 主要应用于溶液弹性光散射测量的仪器，包括激光器、光阑、起偏镜、检偏镜、透镜、散射池、光电倍增管和数据处理系统等。它可在较大角度（30°～140°）范围测定散射光强角度分布。

归一化法 normalization method 一种常用的色谱定量方法。归一化法是把样品中各个组分的峰面积乘以各自的相对校正因子并求和，此和值相当于所有组分的总质量，即所谓“归一”，样品中某组分 i 的百分含量可用下式计算。

$$P_i\% = \frac{A_i f_i}{A_1 f_1 + A_2 f_2 + \cdots + A_n f_n} \times 100$$

式中，f_1、f_2、…、f_n 为各组分的相对校正因子；A_1、A_2、…、A_n 为各组分的峰面积。如果操作条件稳定，

也可以用峰高归一化法定量，此时组分 i 的百分含量可按下式计算。

$$P_i\% = \frac{h_i f_i}{h_1 f_1 + h_2 f_2 + \cdots + h_n f_n} \times 100$$

式中，f_1、f_2、…、f_n 为各组分在该操作条件下特定的峰高相对校正因子；h_1、h_2、…、h_n 为各组分的峰高。用归一化法定量时，必须保证样品中所有组分都能流出色谱柱，并在色谱图上显示色谱峰。

归一化结构因子 normalized structure factor 经过校正的结构因子，用 E_{hkl} 表示。

$$E_{hkl} = \frac{F_{hkl}}{\sqrt{\varepsilon_{hkl}(\sum_j f_j^2)}}$$

式中，F_{hkl} 是衍射 hkl 的结构因子；f_j 是第 j 个原子的原子散射因子；ε_{hkl} 是与晶系和衍射指标有关的整数，通常为 1。在归一化结构因子中校正了衍射角和入射 X 射线波长对原子散射因子的影响（因为 f_j 是 $\sin\theta/\lambda$ 的函数），相当于使用了点原子模型。测定晶体结构时，在直接法中用归一化结构因子代替结构因子推测衍射的相角，可使问题简化。

规程 regulation 为设备、结构或产品设计、制造、安装、维修或使用而规定的操作或方法的文件。规程可以是标准、标准的一部分或与标准无关的独立的文件。

硅胶 silica gel 硅胶属于氢键型固体吸附剂。在气-固色谱中可用于低碳烃、含硫、含氟等气体的分析，在液-固色谱中可用于极性化合物的分析。由于硅胶表面硅醇基团的强吸附作用，常使色谱峰形不对称，使分辨率受到影响，因而硅胶的应用受到限制。但当硅胶经过衍生化处理后，硅胶表面的活性基团被封闭不再有活性，或通过键合其他极性化合物来调整其极性，键合相的硅胶得到了广泛的应用。

硅胶薄层色谱板 silica TLC plate 将含 5% ~ 20% 石膏粘合剂的硅胶微粒用水调成浆状，均匀地铺在一块玻璃板或其他材料的平板上，形成一定厚度的薄层，制成硅胶薄层色谱板。它是使用最广泛的薄层色谱板。在其中可以加入荧光剂，用以检测分开的有机物斑点。可用于各种物质的分离。硅胶层厚度一般为 250μm，高效薄层厚度则小于 200μm。硅胶为多孔微粒，粒度为 5 ~ 40μm，比表面积 300 ~ 400$m^2 \cdot g^{-1}$。孔径范围为 2.0 ~ 15.0nm（通常为 4 ~ 8nm）。比表面积大，粒度小的硅胶可获得高效分离。

硅胶基质离子交换剂 silica-gel substrate ion exchanger 在硅胶微粒表面键合或包覆上各种离子交换基团所得到的离子交换剂。如在硅胶表面的硅醇基上接入带磺酸基、磷酸基或羧酸基的硅烷，就可以得到硅胶基质的阳离子交换剂。该类离子交换剂能耐较高压力、热稳定性好、分离效率高、通常不产生溶胀和收缩、耐有机溶剂，但因氧化硅具有弱酸性，所以硅胶基质填料只能使用中性和弱酸性流动相。

硅胶吸附剂 silica adsorbent 硅

胶是用处最广泛的一种吸附剂。是由多孔 SiO_2 制成的微粒状物质。吸附用硅胶具有大的比表面积，丰富的孔结构。硅胶表面为大量的硅羟基覆盖，因此硅胶吸附剂为极性的吸附剂。主要用于吸附分离极性大的物质，如除去气体、液体中水和强极性杂质。硅胶是薄层色谱板的最常用固定相。粒度通常为5～40μm。比表面积为300～400$m^2 \cdot g^{-1}$。比表面积大，粒度小而分布均匀的吸附剂能获得好的分辨力，硅胶薄层板主要用于中等至强极性的物质分离。

硅烷化法 silanizing 对载体进行钝化处理的一种方法，通过硅烷化试剂二甲基二氯硅烷或六甲基二硅胺与载体表面的硅醇基团进行反应，除去载体表面的氢键结合能力，以改善载体表面的性能。具体做法是将载体浸泡于二甲基二氯硅烷的甲苯溶液中，让其反应，然后用甲醇洗涤，烘干后备用。

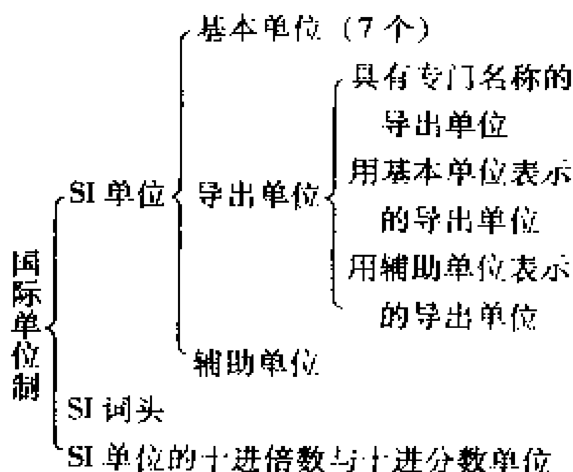
硅烷化载体 silanized support 基质表面通过硅烷化反应导入烷基链作功能基团的色谱填料，如 C_8 柱、C_{18} 柱、苯基柱的填料就是典型的硅烷化载体。

硅藻土 diatomite 主要由硅藻遗体组成，硅藻壳的主要矿物成分是蛋白石 $SiO_2 \cdot nH_2O$。个体很小，为0.002～0.15mm，白色或浅黄色，质软而轻，相对密度0.4～0.9，孔隙度大，可达90%，有极强的吸水性，是热、声和电的不良导体。在化学工业中，常用作催化剂中的辅助物或载体，还可作填料、吸附剂、洗涤剂、金属的擦光剂和用以制造水玻璃。在制糖、食品和石油工业上用作漂白剂。

国际纯粹与应用化学联合会 international union of pure and applied chemistry; IUPAC 世界著名化学家和各国化学团体联合组成的学术组织，1919年成立，秘书处设在英国牛津。它是国际科学联合理事会（ICSU）的成员。其宗旨是：为促进各会员国化学家之间的持续合作，研究纯粹化学和应用化学方面急需规范化、标准化或制定法典的重要国际性问题，与处理化学问题的其他国际性组织协作，为纯粹化学和应用化学在各方面的进步做出贡献。IUPAC的权力机构是会员代表大会，每两年一次，具体讨论和通过各专业委员会提出的报告和推荐的命名法、标准、术语、符号、原子量及计量单位等相关提案。中国于1979年9月加入该组织。

国际单位制（SI） international system of units; SI 是1960年第十一届国际计量大会提出并建议世界各国采用的一种单位制。国际单位制符号SI是法文 Système International d'Unités的缩写。它由SI单位、SI词头和SI单位的十进倍数与分数单位三部分组成。SI单位包括基本单位、辅助单位和导出单位。基本单位有7个，即：质量单位——千克（kg）；时间单位——秒（s）；电流单位——安培（A）；热力学温度单

位——开尔文（K）；物质的量单位——摩尔（mol）；发光强度单位——坎德拉（cd）。辅助单位有两个，即：平面角单位——弧度（rad）与立体角单位——球面度（sr）。导出单位由基本单位和辅助单位导出，力学、声学、热学、电学、磁学、光学、物理化学、原子和分子物理学等各种物理量除了用基本单位和辅助单位表示之外，几乎都可用导出单位表示。国际单位的组成如下



SI 单位制消除了用同一单位表示不同的物理量和用不同的单位表示相同的物理量的混乱现象，多种单位制混用或并用的不统一的现象，适用于所有的专业领域，有利于促进了国际间科学技术的交流与贸易往来。

国家计量基准 national primary standard of measurement 在特定的计量领域内复现和保存计量单位并具有最高计量学特性，经国家鉴定、批准作为统一全国量值最高依据的计量器具。

果蔬酸度测定 acidity in fruits and vegetables 果蔬中含有的有机酸包括苹果酸、柠檬酸、酒石酸、草酸、琥珀酸、异柠檬酸、奎宁酸、富马酸、马来酸、延胡索酸、苯甲酸、乳酸、丙二酸等，即使在一种果蔬内也往往含多种有机酸。果蔬的酸度成分测定方法有化学方法和仪器分析方法。总酸度常用 0.1mol·L^{-1} NaOH 标准溶液滴定法来测定。有时用测定食品中的 pH 值来表示有效酸度。各种有机酸的含量的测定，是先将其衍生化为酯，再用气相色谱法测定，或者直接用高效液相色谱法测定。

果蔬营养分析 nutrition analysis of fruits and vegetables 指水果和蔬菜营养成分的测定，包括甜度、酸度、糖分、水溶性和脂溶性维生素含量、矿物质和微量元素含量测定等。

过饱和度 super-saturability 在沉淀法分离过程中，溶液的离子乘积超过沉淀物的溶度积 K_{sp} 时，才能生成沉淀。要得到沉淀物，不同的物质需要过量的程度不同。用过饱和度来表示这个过量的程度。过饱和度是指溶液中非平衡离子浓度 U 与平衡溶解度 S 之间的差值，过饱和度 $= U - S$。常使用相对过饱和度更方便，相对过饱和度 $=\frac{U-S}{S}$。为了产生某些沉淀，不同体系所需的相对过饱和度不同，例如：AgCl，1.7；$SrSO_4$，10；$BaSO_4$，32；$PbSO_4$，45。在沉淀过程中，相对饱和度越大，形成晶核的体积越小，晶粒越多。相对过饱和度越低，形成晶核的体积越大，晶粒数越少。晶粒小比表面积就大，吸附其

都很困难。因此沉淀分离过程最好是在低的相对过饱和度下进行。

过饱和溶液 supersaturation solution 一定温度下，溶质在某种溶剂中的溶解达平衡时，溶质的溶解速率与从溶液中析出的速率相等，此时的溶液称饱和溶液，溶质的溶解量最大且为定值。过饱和溶液则是一种亚稳状态的溶液，此状态下溶质的浓度暂时超过了饱和溶液时的浓度。例如，将20℃的乙酸钠饱和水溶液非常小心地冷却到0℃，过量的乙酸钠暂时不会因温度降低而析出，即形成了过饱和溶液。如果此时加入一小粒乙酸钠晶种或剧烈搅拌此溶液，就会破坏这种亚稳定状态，立即析出乙酸钠晶体，直到形成对应0℃的稳定的饱和溶液。

过程分析化学 process analytical chemistry 是指在传统工业生产过程中，从原料、工艺流程条件的优化、中间产物分析到最终产品的质量检验，总称过程分析，以求降低能源、资源和时间消耗，提高生产效率和产品质量。过程分析化学要求分析人员走出实验室，进入生产过程参与质量保证。这是一门新学科，是关于发明与发展新的在线分析方法、分析技术、分析仪器以及自动化学过程的综合性很强的交叉学科。有离线分析、现场分析、在线分析、线内分析（inline analysis）和线外分析（或称非接触分析）几个不同的技术层次。

过渡时间 transition time 在计时电位法及其有关的方法中，由开始电解至被测物在电极表面的浓度降为零，引起电位降所消耗的时间。

过渡性信号 transition- state signal 是样品区带流在流动过程中径向和轴向分散而变性后得到的信号，是前高后低略有拖尾的窄峰状。产生的条件是进样体积小于产生稳态信号的最小进样体积。此信号与FIA系统的物理与化学动力学状态有密切关系。因此，系统的流速，试剂浓度，流路的长短和形状，特别是进样体积的大小，均影响过渡性信号的大小。

过击线 overshoot line 也叫外来线（extra line）。无规样品的ESR谱中的吸收峰来源于具有与外磁场 $\boldsymbol{H}$ 平行的主轴方向的那部分顺磁物种的跃迁，因此由ESR谱的主要峰线可得到有关主值的信息。例如具有轴对称的场合，线型函数为 $S(\boldsymbol{H})=\sin\theta/|\mathrm{d}\boldsymbol{H}/\mathrm{d}\theta|$（$\theta$ 为 $\boldsymbol{H}$ 与 z 轴的夹角，$0\leqslant\theta\leqslant\frac{\pi}{2}$）。当 $|\mathrm{d}\boldsymbol{H}/\mathrm{d}\theta|\to 0$（或 $|\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}\boldsymbol{H}|\to\infty$）时，表示在 $\boldsymbol{H}$ 附近会有吸收强度的急剧变化，即出现很强的吸收峰。$\theta=0$，$\theta=\frac{\pi}{2}$ 时，分别相当于 z 方向和 xy 平面的主轴方向与外磁场 $\boldsymbol{H}$ 平行，因而有很强的吸收峰。但有时，除了主轴方向以外还存在一些角度（使外磁场 $\boldsymbol{H}$ 的取向满足 $|\mathrm{d}\boldsymbol{H}/\mathrm{d}\theta|\to 0$），这些角度称为角度异常，而由此引起的吸收峰是在主轴方向的峰之外多出来的谱线，就称为过击线（或外来线）。铜（Ⅱ）化合物的

ESR 谱中常会出现过折线。

过滤 filtration 溶液与沉淀物分离的基本方法之一。将溶液与沉淀物一起通过过滤器，沉淀物留在过滤器上，溶液通过过滤器（称为滤液）。被过滤溶液的温度、黏度、过滤时的压力、过滤器孔隙大小和沉淀物的性质都会影响过滤的速度。过滤时根据不同情况，可选用不同的过滤方法。常用的过滤方法有三种：（1）常压过滤；（2）减压过滤；（3）热过滤。

过敏反应 anaphylaxis 处于某种免疫致敏状态下的机体，在抗原侵入时所引起的一种速发型过敏反应，属于Ⅰ型变态反应。给已用某种抗原致敏的动物，静脉注射少量的抗原后可在数分钟内引起种种发作而死亡。有时即使不把抗原注射入静脉，也可引起此种反应，例如青霉素过敏性休克。过敏反应是抗原致敏的结果。

过失误差 gross error; mistake error 由于测量人员的过失而产生的数值远大于正常情况下的随机误差和系统误差的误差。过失误差因人而异，无规律可循。不管造成过失误差的具体原因是什么，只要确知存在过失误差，就应将含有过失误差的测量值从一组数据中剔除。

过压薄层色谱法 over pressured thin layer chromatography; OPTLC 也叫过压液相色谱法。是20世纪70年代末发展起来的一种新型色谱分析技术，它综合了常规TLC、HPTLC的优点，同时吸取了HPLC的某些特点，采用了一个加压超微色谱室，吸附剂完全被具有一定外压的塑料膜覆盖，展开剂通过泵以恒定速度展开的一种特殊的平面液相色谱技术。它有如下特点：加压超微色谱室可看作是将高效液相色谱柱打开平放，上加气体或水压力缓冲室，其上半部为任意可变的外高压，下半部为硬金属板；展开剂在压力下流动，所以线性展开要求吸附剂层边缘封闭，控制溶剂流，可以进行连续展开、双向展开和高速度样品展开，比HPTLC分辨率高、消耗展开剂少、可得到类似HPLC的洗脱色谱图。

过压液相色谱法 over pressured liquid chromatography; OPLC 见过压薄层色谱法条。

过氧草酰类化合物 peroxyoxalate 过氧草酰类化合物（Ⅰ）包括草酰氯、草酸酐、草酰酯和草酸酰胺等衍生物，是一类常见的高效率化学发光试剂。其产生化学发光发射的中间体为1，2-二氧杂环丁二酮（Ⅱ）。处于激发态的1，2-二氧杂环丁二酮（Ⅱ）中间体可将能量转移给某一荧光化合物，后者产生化学发光。目前最常用的过氧草酰类化合物是TCPO［双-(2,4,6-三氯苯基）草酰酯］，化学发光量子产率约为18%。

过氧化酶-抗过氧化酶技术 peroxidase-anti-peroxidase technique 一种改良的酶标记技术。通过结合辣根过氧化物酶与兔抗过氧化物酶免疫复合物来检测组织中的抗原或抗体。将组织切片与家兔抗体一起孵育，使其特异性地结合；然后加过量的抗兔

IgG，接着加入免疫复合物。抗兔IgG把抗原结合的抗体连接到PAP复合物上；然后与酶底物一起孵育，便产生呈色反应。这种方法由于PAP复合物的放大效应，比单独酶染色方法灵敏得多。

过氧化氢酶试验 catalase test 用于测定一定的细菌菌株是否产生过氧化氢酶的试验。在细菌菌落上（或在细菌悬液中）加一滴过氧化氢溶液，立即或几秒钟内出现气泡即说明过氧化氢酶存在（阳性）。如用含血培养基时，要小心防止过氧化氢和培养基接触，因为红血球含有过氧化氢酶，会产生假阳性反应。

H

哈恩回波 Hahn echo 在$\frac{\pi}{2}-\tau-\pi$的脉冲序列作用下形成的自旋回波。因为哈恩（Hahn）首先提出这一自旋回波的概念，故称为哈恩回波。参见**电子自旋回波**条。

哈克尔截面 Harker section 测定晶体结构时，在向量空间中选出的特殊截面，因为最早由D. Harker提出而得名。根据晶体的对称性，同一等效点系的原子之间向量会落在一些特定的截面上，例如在$P2_1$空间群中，存在着与b轴重合的2_1螺旋轴，由此对称性联系起来的一对等效原子的坐标分别为（x，y，z）和（$-x$，$\frac{1}{2}+y$，$-z$），它们之间的向量峰就会落在平面$y=\frac{1}{2}$上，这种平面就是哈克尔截面。在向量空间选算适当的哈克尔截面，就可以推导出原子在晶胞中的坐标位置。

哈特利检验法 Hartley's test 一种统计检验多个方差齐性的方法。使用的检验统计量

$$F_{max}=\frac{S_{max}^2}{S_{min}^2}$$

式中，S_{max}^2与S_{min}^2分别是被检验的m个方差中的最大与最小方差。当由实验样本数据计算的F_{max}大于哈特利检

验临界值表中给定显著性水平 α 与相应自由度 $f=n-1$ 时的临界值 $F_{\alpha(m,f)}$，则判 S^2_{max} 与其他方差之间存在显著性差异。本检验法只适用于测量次数 n 相同的各方差的检验。

哈特曼光阑 Hartman diaphragm 用于发射光谱的一块由金属制成的多孔遮光板。光阑放在狭缝前，摄谱时移动光阑，使不同样品或同一样品不同阶段的光通过光阑不同孔径摄在感光板不同位置上，而不用移动感光板，这样可使每次拍谱时光谱谱线位置都不会改变。

哈特曼内插法 method of Hartman interpolation 哈特曼内插法考虑了棱镜介质的折射率与波长的关系，给出了一个较好的计算方法。哈特曼公式为

$$\lambda=\lambda_0+\frac{e}{(n+n_0)^{1/a}}$$

式中，λ 为未知波长；λ_0 是具有波长量纲的常数；e 为在该波长区域内的常数；n 为棱镜物质对不同波长的折射率；n_0 为常数；当波长间隔不大时（数十纳米）；a 为常数。上式在实际应用仍不够方便，于是采用了更为简化的近似公式

$$\lambda=\lambda_0+\frac{C}{d_0-d_x}$$

式中，λ_0，C，d_0 为常数；d_x 为谱片上任一点到谱线 λ_x 间的距离。假如三条已知谱线的波长为 λ_1、λ_2、λ_3，每条谱线到所选点距离为 d_1，d_2，d_3，代入近似公式，可得 3 个方程：

$$\lambda_1=\lambda_0+\frac{C}{d_0-d_1};$$

$$\lambda_2=\lambda_0+\frac{C}{d_0-d_2};$$

$$\lambda_3=\lambda_0+\frac{C}{d_0-d_3}$$

解以上 3 个方程，可得 λ_0，C，d_0 值，然后根据未知谱线到所选点的距离 d_x，代入近似公式，即可求出未知谱线的波长。

哈维法 method of Harvey 在激发条件一定与谱线自吸可以忽略的条件下，谱线强度 I_L 与其邻近背景强度 I_B 之比，与试样中被测元素的浓度 c 成正比

$$c=k\frac{I_L}{I_B}=k\left(\frac{I_L+I_B}{I_B}-1\right)$$

$$=k\left(\frac{I_{L+B}}{I_B}-1\right)$$

式中，k 为比例常数；I_{L+B} 是谱线加上背景的强度。若指定每条谱线邻近的背景为 1，则 $c=k(I_{L+B}-1)$。若选择 $\frac{I_{L+B}}{I_B}=1.5$，即 $\frac{I_L}{I_B}=0.5$ 作为能将谱线从背景中分辨出来的觉察极限。因此在觉察极限浓度 c_0 时

$$c=k\frac{I_L}{I_B}=k\left(\frac{I_L+I_B}{I_B}-1\right)$$

$$=k\left(\frac{I_{L+B}}{I_B}-1\right)$$

由式可知，$k=2c_0$，代入 $c=k(I_{L+B}-1)$ 则 $c=2c_0(I_{L+B}-1)$，式中，c_0 称为灵敏度系数。知道了 c_0、测定 I_{L+B}，便可以求出试样中被测元素的浓度 c。该法的准确度可以达到 30% ~50%。哈维法对大量样品的半定量例行分析是十分方便的。

海洋污染 ocean pollution 海洋约

占地球面积的71%，是地球上最大的水体。目前受污染最严重的是靠近工业发达地区的海域。海洋污染有以下特点：（1）污染源多而复杂，除了海上航行的船只，海上油井外，还有沿海和内陆地区的城市和工矿企业排放的污染物，最后大都进入海洋。如陆地上的污染物可通过河流进入海洋。大气污染物也可以通过气流运行到海洋上空，作为雨水降入海洋。（2）污染的持续性强、危害性大，海洋是各地区污染物的最后归宿，污染物进入海洋后，很难再转移出去，不能溶解和不易分解的污染物（如重金属和有机氯农药等），便在海洋中积累起来，数量逐年增多，还能通过迁移转化而扩大危害。（3）污染范围大，世界上的各个海洋是互相沟通的，海水也在不停地运动着，污染物在海洋中可以扩散到任何角落。

氦电离检测器 helium ionization detector 用于永久性气体超微量分析的一种检测器。它的工作原理是：以高纯氦作为载气，通过有放射氚源的电离室时，由于氚源辐射的β粒子在强电场的作用下，具有很大的能量，与氦原子碰撞，使其由基态激发至具有19.6eV能量的激发态（或称亚稳态），当载气中含有电离势比氦激发电位低的被测组分并通过电离室时，该被测组分即与亚稳态的氦原子碰撞而被电离，使电离室有较大的离子流输出。除氖之外，其他永久性气体它都有响应。这种检测器必须用高纯氦，否则其中的杂质就会使本底电流变大和灵敏度下降，其检测限约为$10^{13}\sim10^{14}$ g·s^{-1}，线性范围为10^5。

含氧化合物分析器 oxygen specific response of the flame ionization detection system；O-FID 主要用于汽油中含氧化合物的分析。检测原理是基于把含氧化合物裂解为CO，然后再经催化加氢把CO转化成甲烷，用FID检测。氧的信号基本上与化合物的总氧原子量成正比，受反应器的基体影响不大，定量计算简单，即可以用分子量与总氧原子量的比值作定量校正因子。O-FID的检测限为60pg·s^{-1}(O)，线性范围为10^5。含氧化合物的选择性受分子量影响很大，高碳数的含氧化合物因氧原子在分子中所占比例很低，故选择检测含氧化合物的灵敏度不高，目前多限于检测C_4以下的含氧化合物。

含样去样检测法 sample in sample out method 选择对被测组分有最大吸收且受其他组分吸收干扰最小的波长为测定波长，测定样品溶液的总吸光度，然后用同一吸收池测定不含该被测组分溶液的吸光度（即背景吸收），二者的差值即为样品的净吸光度。

合并带技术 merging zones technique 是FIA节省试剂的技术之一，典型的合并带技术是指将试样带和试剂带分别注入到两路管道长度相等和流速相同的载流中，然后在汇合点合并。这样，试剂只是在需要时才加入，载液可用较便宜的缓冲溶液。其优点是节省试剂并使流路系统得

到清洗。

合成标准物质 synthetic reference material 本身不能直接使用、而是用来合成所需标准物质的标准物质。如 SO_2 渗透管是一种标准纯气源，使用之前，在一定温度下通入一定流量的载气配制成所需要的标准气体。

合成代谢 anabolism 指细胞的组成成分合成的总过程，包括从最简单的前体合成和从其组分合成两条途径。与分解代谢相反，但都伴随能量代谢，合成代谢为需能反应，ATP 为其提供能量。

合成橡胶的鉴定方法 identification of synthetic rubber 合成橡胶又称人造橡胶，泛指以化学方法合成的高分子弹性体。根据化学结构有烯烃类、二烯烃类、元素有机类等，其中重要的有丁苯橡胶、丁腈橡胶、丁基橡胶、氯丁橡胶、聚硫橡胶、聚氨基甲酸酯橡胶、聚丙烯酸酯橡胶、氯磺化聚乙烯橡胶、硅橡胶、氟橡胶、顺式聚丁二烯橡胶、顺式聚异戊二烯橡胶、乙丙橡胶等。某些合成橡胶具有较天然橡胶更优良的耐温、耐磨、耐老化、耐腐蚀、耐油性能。经硫化后，可制成各种橡胶制品。鉴定合成橡胶时，先鉴定其外观品质、拉伸性能、弹性等，再用红外光谱等手段鉴定其主要成分以确定其为何种合成橡胶。

核纯分析 analysis of nuclear grade 按照核工业对材料纯度的要求，测定核纯材料中的杂质含量。

核磁共振 nuclear magnetic resonance; NMR 原子核有自旋运动。描述其特性的是自旋量子数 I。凡 $I\neq0$ 的核在磁感应强度为 B_0 的外加静磁场中简并的核自旋分裂成（$2I+1$）个分立的能级，当施加一个频率为 ν（通常在射频区）的电磁辐射 B_1，其能量 $h\nu$ 恰好与该核素的相邻磁能级的能量间隔 ΔE 相等时，核体系会吸收电磁辐射，产生能级跃迁，即为核磁共振。共振频率 ν $\left(\nu=\frac{\gamma B_0}{2\pi}\right)$ 与核素的磁旋比 γ 及外加静磁场的 B_0 直接有关。利用此可获得化合物分子的内部的许多结构信息。

核磁共振成像 nuclear magnetic resonance imaging; NMI 若对试样施加一个已知的线性梯度磁场，试样中处于垂直于此梯度方向的平面中的核处于这一特定的磁场强度中，具有相同的共振频率，这一特定频率的 NMR 信号强度正比于该平面中的核自旋数，此时的 NMR 谱信号便是核自旋密度的投影。沿梯度方向上不同垂直平面内的核处于不同的磁场中，有不同的频率共振。沿着梯度方向依次扫描，获取试样核自旋体密度的分布情况，此时梯度磁场场强便成为成像截面的标志。当梯度场施加在互相垂直的 2 个方向或 3 个方向上，经扫描便可获得平面或立体的 NMR 自旋密度的分布图，称为自旋密度成像。现在已发展了许多成像方法，如投影重建成像，灵敏点、线扫描成像，选择激发成像，场聚焦成像，傅里叶变

换 NMR 成像等。T_1、T_2 弛豫时间成像，定域 NMR 成像等。它获得的信息与 X 射线 CT（computed tomography）的信息互补，更可以获得许多 X-CT 不能获得的信息，现已成为医学诊断研究肿瘤的重要手段之一。

核磁共振条件 nuclear magnetic resonance condition 被分析试样放在静磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中，再施加一频率为 ν（通常在射频区）的电磁辐射 $\boldsymbol{B}_1$，其能量 $h\nu$ 恰好与试样中欲分析的指定核素的相邻磁能级的能量间隔 ΔE 相等时，核体系将会吸收电磁辐射产生能级跃迁，此即核磁共振现象。选律规定了只有相邻能级间的跃迁才是允许的，即要求两核自旋磁量子数之差 $\Delta M_1 = \pm 1$。因此，每种裸核核素的共振只有一个数值。共振必须满足

$$h\nu = \Delta E = | E_{M_1 \pm 1} - E_{M_1} | = \Delta M_1 \cdot \gamma \hbar \boldsymbol{B}_0 = \gamma \hbar \boldsymbol{B}_0$$

或 $\nu = \dfrac{\gamma \boldsymbol{B}_0}{2\pi}$，$\omega = \gamma \boldsymbol{B}_0$，其中 $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$

式中，h 是普朗克常数；γ 是核素的磁旋比；ω 是圆频率；$\omega = 2\pi\nu$。显而易见，核磁共振频率与外加静磁场强度 $\boldsymbol{B}_0$ 成正比。在相同 $\boldsymbol{B}_0$ 下不同核素的共振频率因核的磁旋比 γ 不同也不同。凡 $I=0$ 的核如 ^{12}C 等是不会有核磁共振信号的。

核磁共振中的弛豫 relaxation in NMR 体系从非平衡的激发态恢复到初始热平衡基态释放能量的过程。它可以通过辐射的方式、非辐射方式或同时通过这两种方式来进行。NMR 自旋能级能量间隔小，远小于分子振动能级，更小于电子能级，因此它的自发辐射的几率几乎为零，NMR 信号也容易饱和。NMR 信号之所以能维持是靠弛豫，弛豫常分为横向弛豫与纵向弛豫两类。前者是通过自旋状态的相互交换来实现，而后者是通过热能的形式传递给周围的“环境”来实现的。

核磁-核四极双共振 nuclear magnetic-nuclear quadrupole double resonance 这是通过核磁共振来研究核四极共振的重要方法，特别是对丰度低，四极共振频率低因而灵敏度低而不便观测核四极共振信号的核，在外磁磁场中四极核 Q 的四极共振频率和非四极自旋核 P（比如 ^1H 核）的核磁共振频率相差很远，可以利用这两种核自旋系统之间的耦合关系，采用绝热去磁或旋转坐标系中核磁-核四极交叉极化，使 Q 核某四极跃迁能与 P 核拉摩进动能相等，则 P、Q 两种核之间产生能量交换，结果使两个系统的自旋温度趋于一致。使 Q 自旋从射频场吸收的能量传给 P 自旋。当辐照场频率扫过整个四极共振区段时，探测 P 自旋的 FID 信号，便获得 Q 自旋四极共振图谱。

核磁矩 nuclear magnetic moment 核都有自旋运动，产生核磁矩，记以 μ_N。它的绝对值取决于自旋量子数 I。

$$|\mu_N| = g_N \beta_N \sqrt{I(I+1)}$$

式中，g_N 是核的朗德因子；β_N 是核磁子；核磁矩在外加磁场 Z 方向上的投影有：$\mu_{N_z} = g_N \beta_N m_I$，$m_I$ 是核自

旋磁量子数，其最大值为$\mu_{N_z}(\max)=g_N\beta_N I$。

核磁矩的拉摩进动 Larmor precession of nuclear magnetic moment 根据经典力学理论，具有磁矩的原子核（或电子），因其自旋运动高速旋转而相当于一个陀螺。当它在外加静磁场$\boldsymbol{B}_0$中便受到一个力矩（$\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{B}_0$）的作用，核磁矩或电子磁矩绕$\boldsymbol{B}_0$作旋进运动，即拉摩（Larmor）进动。拉摩进动的角频率$\omega_0=-\gamma\boldsymbol{B}_0$，$\gamma$为核（或电子）的磁旋比。$\gamma$值的正负号决定了进动方向，$\gamma$为正者绕$\boldsymbol{B}_0$作左旋圆进动$[\exp(-i\omega_0 t)]$，$\gamma$为负者则绕$\boldsymbol{B}_0$作右旋圆进动$[\exp(i\omega_0 t)]$。

核磁子 nuclear magneton 核磁矩的单位，记以β_N。其值为$\beta_N=\frac{eh}{4\pi cm_p}=5.0505\times10^{-27}\mathrm{J\cdot T^{-1}}$。因为质子质量$m_p$是电子质量$m_e$的1836倍，所以核磁子比电子磁子小3个数量级。

核的自旋-自旋耦合 nuclear spin-spin coupling 核自旋量子数$I\neq0$的核在静磁场中有$(2I+1)$种自旋状态，它们的磁矩的方向与大小各不相同，所形成的附加磁场通过连接核间化学键的传递而作用于与其连接的核。这种作用是相互的，称为自旋-自旋耦合。它是靠核自旋与成键电子的自旋之间及成键电子之间的相互作用逐一传递的，与核所在分子的取向无关，是一种标量的耦合。AB两核之间的这种作用能E与它们的自旋量子数I_A、I_B的标量积成正比：$E=J_{AB}I_AI_B$，式中，J_{AB}是自旋-自旋耦合常数，一般简称为耦合常数，其量纲为Hz。它由分子结构所决定，与外加静磁场强度无关。耦合作用导致核磁能级或谱线的进一步分裂而呈更精细的结构。分析谱图精细结构的形成可确定分子内部各基团之间的联结关系，进而获取分子总体的空间结构。因此自旋耦合是NMR波谱法中极其重要的信息。并且是不能从MS，IR，UV-VIS等光谱法中得到的特有的信息。

核反应 nuclear reaction 粒子（中子、α粒子、β粒子、γ光子等）或重离子与原子核之间的相互作用引起的各种变化的过程。核反应是宇宙中普遍存在的自然现象，现今存在的化学元素除氢之外都是通过核反应合成的。按轰击原子核的入射粒子不同，核反应可分为中子核反应、带电粒子核反应和光核反应三类。按入射粒子能量大小，核反应可分为低能核反应，入射粒子能量$<5\times10^7$eV；中能核反应，入射粒子能量在$5\times10^7\sim10^9$eV之间；高能核反应，入射粒子能量$>10^9$eV三类。［注：$1\mathrm{eV}=(1.602\ 189\ 2\pm0.000\ 004\ 6)\times10^{-19}\mathrm{J}$］。

核反应截面 cross section 一个入射粒子轰击单位面积靶上的一个靶核发生某一核反应的几率。它表征该原子核与入射粒子相互作用引起核反应可能性的大小，是核素的一种属性。用σ表示，具有面积的量纲，国际

单位制是 m^2。常用单位是靶恩，用 b 表示，$1b = 10^{-28}m^2$。

核分析 nuclear analytical method 又称放射分析。指通过测定放射性或核现象进行微量分析的方法。核分析中常用的方法可分为两类：（1）用放射性同位素作指示剂的方法，如：放射分析法、放射化学分析、放射免疫分析、同位素稀释法等；（2）选择适当种类的能量的入射粒子轰击样品，探测样品中放出的各种特征辐射的性质和强度的方法，如：活化分析、粒子激发、X 射线荧光分析、穆斯堡尔谱、核磁共振谱、正电子湮没和同步辐射等。放射分析方法与一般分析方法相比，有下列特点：基于测量放射性或特征辐射，分析灵敏度高，准确度高，分析速度快，方法简便可靠，取样量小，有时还可以不破坏样品结构等。

核辐射 nuclear radiation 原子核衰变、核能级跃迁或核反应过程中产生的辐射。核辐射有 γ 辐射、α 辐射、β 辐射与中子辐射以及各种加速器中加速的粒子束辐射等。核辐射通过物质时，与物质相互作用损失其能量，并引发物质发生一系列物理和化学变化，借此可以探测核辐射，也是开发应用核辐射（如辐射育种、辐射加工、食品辐射保存等）的基础。

核辐射探测器 nuclear radiation detector 能够指示、记录和测量核辐射与核辐射探测器内的物质相互作用而产生某种信号（如电、光脉冲或材料结构的变化）的器件或装置。通过对放大后的信号的分析，可以确定粒子的数目、位置、能量、动量、飞行时间、速度、质量等物理量。按记录信号的方式，核辐射探测器分为计数器与径迹室两大类。计数器以脉冲形式记录和分析辐射产生的信息，包括气体电离探测器、闪烁计数器、半导体探测器、多丝室和漂移室等。径迹室是通过记录和分析辐射产生的径迹图像测量核辐射，包括核乳胶、云室和泡室、火花室和流光室、固体径迹探测器等。

核苷 nucleoside 嘌呤碱基与 D-核糖或脱氧核糖键合构成的分子，可由从头合成途径合成，也可由核苷酸分解代谢途径产生。

核苷酸 nucleotide 核苷的糖部分形成磷酸酯时，称为核苷酸。核酸是嘧啶和嘌呤碱基核苷酸的多聚体，天然核苷酸除作为核酸合成的前体物质、磷酸供体和变构效应因子而游离存在外，多成为各种辅酶或辅酶的组成成分。糖部分为 D-核糖者为核糖核苷酸，可由 RNA 水解获得。糖部分为 D-2′-脱氧核糖者为脱氧核糖核苷酸，可由 DNA 水解获得。加酸水解时易于分离出嘌呤碱基，而不易分离出嘧啶碱基。作为水解 RNA 所得到的核苷酸，根据多核苷酸水解的方式和标准样品的种类可得到 2′-，3′-或 5′-磷酸，而 2′-磷酸和 3′-磷酸可由酶的作用经过 2′-，3′-磷酸酐而发生转移。在物体中也存在着 cAMP 那种于核糖的 3′，5′间形成的环状磷酸酯。

核间偶极相互作用 internuclear dipole-dipole interaction 核的自旋运动产生的磁矩可作为磁偶极子。分子内核1的磁矩 $\boldsymbol{M}_1$ 受另外一核2的磁矩 $\boldsymbol{M}_2$ 的磁场作用，同样 $\boldsymbol{M}_2$ 也受到 $\boldsymbol{M}_1$ 产生的磁场作用，这种磁偶极间的相互作用称为偶极-偶极相互作用。这个偶极相互作用能 H_D 为

$$H_D = \frac{\boldsymbol{M}_1 \cdot \boldsymbol{M}_2}{r^3} - \frac{3(\boldsymbol{M}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{M}_2 \cdot \boldsymbol{r})}{r^5}$$

对应的核磁矩 $\boldsymbol{M}_1 = \gamma_1 \hbar \boldsymbol{I}_1$；$\boldsymbol{M}_2 = \gamma_2 \hbar \boldsymbol{I}_2$，$\gamma$ 是核素的磁旋比。当磁偶极矩1和2间的夹角为 θ，距离为 r，则作用能正比于 $\gamma_1\gamma_2\hbar^2 r^{-3}$ $(1 - 3\cos^2\theta)$。可见它与分子的取向有关。固体物质中核的这种偶极子的相互作用导致NMR谱线产生复杂的精细结构。在液体高分辨NMR中由于分子的快速无规运动，这种作用被平均化了，可以不予考虑。

核间耦合作用 internuclear coupling 在分子内甚至分子之间，原子核之间存在着两种磁相互作用，称为核间耦合作用。由于这些作用使核磁共振谱图中有关谱峰呈多重峰。耦合作用之一是两核核磁矩产生的直接的偶极相互作用，它与分子的取向有关，称为直接耦合。它包括在空间距离相当接近时两核呈现的空间耦合。作用之二是两核核磁矩通过它们之间的化学键传递的，因此称为间接偶合，它与分子的取向无关，是一种标量的耦合。

核间双共振 internuclear double resonance；INDOR 核间双共振的方法所记录的共振频率与一般的NMR谱有很大的区别。它是将观测射频频率 ν_1 始终固定在某一要研究的峰尖，同时辐照场 B_2 满足 $\frac{\gamma B_2}{2\pi}$，在线宽范围之内，连续改变 B_2 的频率，扫过全谱，记录观测峰的谱线的幅度的变化，一般这个变化大约是峰高的20%～50%，这就是INDOR信号。改变观测峰位可获得一系列INDOR谱。它的特点是：（1）被监视的谱线与被干扰的谱线若无共同能级时，无INDOR信号；有共同能级时，才出现INDOR信号。（2）INDOR信号有正有负，由两谱线所涉及的跃迁的3个能级关系来确定。一般是前进式跃迁关系则出现正INDOR信号，反射式跃迁出现负的INDOR信号。INDOR实验可以简化弱耦合复杂体系的图谱，直接测定耦合常数和确定其相对符号，发现重叠信号中所隐藏的谱线，便于谱线的归属和结构的分析。此方法仅在连续波核磁共振谱仪上实现。

核孔膜 nuclear pore film 将10～15μm厚的致密塑料薄膜（一般用聚碳酸酯），先用反应堆产生的裂片轰击，穿透薄膜而产生损伤的孔径，然后在一定温度下用化学试剂侵蚀成一定尺寸的孔。核孔膜的特点是孔为圆柱形直孔，孔短，孔径均匀，大小可以较精确地控制。

核朗德因子 nuclear Lande factor 核朗德因子反映了原子核的特性，以 g_N 表示，其量纲为1。大多数核素的

$|g_N|$ 值在 0.1 ~6 之间。有的核素为正值，有的核素为负值。质子的 $g_N=5.58536$。

核欧沃豪斯效应 nuclear Overhauser effect; NOE 饱和一种核共振，观测另一种核的共振信号，是核与核之间的效应。当用一射频场作用到试样上使某核共振达到饱和，与之相应核能级的布居数相等，这样改变了与该核相关的其他核自旋能级的布居数的平衡分布，这时其他核自旋有关能级上的布居数差所发生的变化，取决于被辐照核与观测核的磁旋比 γ_I 和 γ_S。倘若恢复原有热平衡分布的主要途径是通过偶极-偶极弛豫机理进行的话，NOE 的增强因子 η 达到最大，$\eta=\frac{\gamma_I}{2\gamma_S}$，使 S 核的信号放大 $f=1+\eta$ 倍。当辐照 ^1H 而观测 ^{13}C 时，信号强度为原来的 3 倍。观测 ^{15}N 时，因 $\gamma_N<0$ 故增强因子是负值，$\frac{\gamma_H}{2\gamma_N}=-5$，$f=-4$，因此获得负信号（负峰）。在伴有其他弛豫作用的情况下 η 小于此值。NOE 主要应用于提高信噪比，获得耦合信息，确定核之间空间的距离等。

核塞曼相关电子-核双共振 nuclear Zeemann correlated electron-nuclear double resonance 每一种核都具有自己固有的 g 因子，因而在相同外磁场 H_0 下不同的核所具有的核塞曼频率 $\left(\nu^I=\frac{g_I\beta H_0}{h}\right)$ 也不同。核塞曼相关电子-核双共振正是巧妙利用了这一原理。用频率为 Ω、振幅为 B_m 的方波对常规 ENDOR 中的固定磁场 H_0 进行调制，则核塞曼频率所受到频率调制的程度 $\nu_{m0}^I=\frac{g_I\beta_n B_m}{h}$ 因核的 g_I 不同而不同。此时进而用频率为 Ω，频幅为 ν_m 的方波对射频场进行频率调制，ENDOR 信号强度将随 Ω 变化。当 ν_m 正好等于某一核的 ν_{m0}^I，若调节频率调制与磁场调制具有反相位，则能够抵消掉磁场调制的效果，使该核的 ENDOR 信号消失。正因如此，通过消除任意核的 ENDOR 信号，可以简化 ENDOR 谱，容易进行跃迁归属和核种类的指认。由于这种方法要求 ESR 线型对称，所以不适用于粉末或低温样品。

核四极矩共振 nuclear quadrupole resonance; NQR 核自旋量子数 $I>\frac{1}{2}$ 的原子核具有核四极矩。在不均匀电场中，因电场梯度的作用，具有核四极矩的原子核的 $2I+1$ 重简并能级发生裂分，其能级间的跃迁一般是磁偶极矩跃迁，可发生射频范围的共振吸收。若同时加上外磁场 $\boldsymbol{H}$，当 $\boldsymbol{H}$ 较小时，可观测到共振吸收的塞曼效应；当 $\boldsymbol{H}$ 较大时，可观测到塞曼能级的核四极矩位移。通过这些测定，能够得到核四极矩、分子内部微观电场梯度等信息。

核四极矩相互作用 nuclear quadrupole interaction 对于核自旋量子数 $I>\frac{1}{2}$ 的原子核，正电荷在原子核

表面是非球对称分布，相当于在正电荷均匀球对称分布的基础上又加上一对电偶极矩。可以认为正电荷是分布在旋转椭圆体形表面上，这种非球对称的电荷分布使原子核具有核四极矩。核四极矩包括电核四极矩和磁核四极矩。电核四极矩比磁核四极矩重要得多，因此核四极矩通常特指电核四极矩。当具有核四极矩的原子核处于不均匀电场中时，核四极矩与电场梯度将发生相互作用形成静电相互作用能。电场梯度是由静电势 V 的二次微分定义的张量，因此在自旋哈密顿中核四极矩能量项可写成

$$\hat{H}=\hat{I}\cdot Q\cdot\hat{I}$$

这里 Q 是核四极矩张量。通常可将上式展开写成如下形式

$$\hat{H}_Q=\frac{e^2Qq}{4I\ (2I-1)}\left[3\hat{I}_z^2-I\ (I+1)\ +\eta\ (\hat{I}_x^2-\hat{I}_y^2)\right]$$

式中，eQ 是核四极矩；eq 是电场梯度；η 是不对称参数。q 和 η 的表达式分别定义为

$$q=\frac{\partial^2V}{\partial Z^2},\quad \eta=\frac{\left(\frac{\partial^2V}{\partial x^2}-\frac{\partial^2V}{\partial y^2}\right)}{\left(\frac{\partial^2V}{\partial z^2}\right)}$$

通过解析 ESR 谱中由核四极矩相互作用引起的二级效应或禁阻跃迁可以确定核四极矩张量及核四极矩耦合常数（e^2Qq）。

核素 nuclides 以原子核的质子数 p 和中子数 N、或原子序数 $Z(=p)$ 和原子质量数 $A(=Z+N)$ 表征的原子。泛指各元素的各种原子。用现代探测器能够探测到其放射性的核素称为放射性核素，不能探测到其放射性的核素称为稳定性核素。不能在一个可以测量的时间内（10^{-10}s）存在、而迅速衰变着的激发态原子与核反应中不稳定的中间体都不是核素。核素的表示方法是在元素符号的左下角标以 Z、左上角标以 A、质量数后面标有 m 的，表示同质异能素，如 $^{16}_{8}O$，$^{113}_{49}In$、$^{113m}_{49}In$。

核酸 nucleic acid 由一个戊糖、一个磷酸和一个碱基组成的分子，即核苷＋磷酸基。核苷酸是构成核酸的基本单元，细胞中核苷酸能以游离状态存在。核苷酸可以含有 1 个、2 个或 3 个磷酸基，分别称核苷一磷酸（如 AMP、CMP、GMP、UMP、dAMP 等）、核苷二磷酸（如 ADP、CDP、dADP 等）和核苷三磷酸（如 ATP、dATP 等）。

核酸吸印技术 nucleic acid blot technique 1975 年由 Southern 建立的一种分离和鉴别基因克隆增殖中某些特异 DNA 片段的技术。将琼脂糖凝胶电泳后的 DNA 片段吸印在硝酸纤维素膜上，再与 ^{32}P 标记的 DNA 或 RNA 探针杂交进行放射自显影。

核糖核酸 ribonucleic acid; RNA 细胞内存在两大类核酸：核糖核酸和脱氧核糖核酸（DNA），两者在结构上的主要区别在于前者核糖 2 位上具有羟基，后者则无，这一差异使前者对碱性环境敏感，而后者对碱具有抗性。RNA 是由核糖、磷酸、碱基（A、C、G、U）所组成的核苷酸按

一定排列形式构成的长链，尿嘧啶（U）是只存在于 RNA 而不存在于 DNA 的碱基，因此标记的尿嘧啶核苷掺入 RNA 链可以作为 RNA 合成的特异性前体，判断特定条件下 RNA 合成的速率和程度。绝大多数 RNA 分子单链，但有的 RNA 分子中存在碱基互补，这些部分可配对形成双链区，RNA 分子可弯曲形成二级结构。真核细胞内主要的 RNA 类型有：（1）hnRNA（核内不均一高分子量 RNA），是结构基因的转录原初产物，其加工修饰后可产生 mRNA；（2）mRNA（信使 RNA），携带结构基因的全部信息，是合成特定多肽或蛋白质的模板；（3）Rrna（核糖体 RNA），与核糖体蛋白构成核糖体，是蛋白质合成的场所；（4）tR NA（转运 RNA），具有携带特定氨基酸能力及反密码区，反密码区可识别相对应的密码，在蛋白质生物合成中起重要作用；（5）snRNA（核内小分子 RNA），具有多种功能，如参与基因表达的调控和转录后加工产物，主要在传递信息方面起重要作用。但是，在某些病毒中，RNA 可作为其基因组的遗传物质。

核糖核酸分析 ribonucleic acid analysis 早在 1868 年米歇尔（F. Mischer）就从外科绷带上的脓细胞的核中分离出一种有酸性的、含磷量极高的有机化合物，到 1889 年阿尔特曼（R. Altman）把它定名为“核酸”（nucleic acid），这种物质广泛存在于生物体内。核酸按其所含的糖不同而分为核糖核酸（简称为 RNA）和脱氧核糖核酸（简写为 DNA）两类。构成核糖核酸的基本单位是核苷酸，是由上百个至几千个核苷酸聚合而成的长链，这种长链又称多聚核苷酸，它可进一步水解成磷酸、核糖和含氮碱基（嘧啶、嘌呤）。可提供核糖核酸结构信息的拉曼光谱有双键振动区、环伸缩振动区、环呼吸振动区和主链振动区。嘌呤和嘧啶碱基的拉曼和红外光谱特征频率可供分析核糖核酸光谱时参考。

核糖核酸酶 A Rnase A 该酶在高浓度时可对单链 RNA 的任何位点进行切割，但在低浓度时只切割 C 和 U 的位点，故可利用这种性质检测寡核苷酸片段中是否含有 C 和 U。

核糖体 RNA ribosomal RNA 构成脂质体粒子的 RNA，是细胞内存在最多的 RNA 的一种。电子显微镜观察表明，在动物细胞的有粒内质网上，附着直径为 15～20nm 的电子密度很高的小微粒，是 RNA-蛋白质的复合体，称为核糖体。用去氧胆酸钠处理有粒内质网，就可从膜上分离到核糖体。除结合在有粒内质网的核糖体外，有时它也在细胞质中以游离状态存在。两者虽然都参与蛋白质的合成，但各自合成的蛋白质在素质上是不同的。也可由细菌或植物细胞分离获得核糖体。真核细胞的核糖体由沉降系数为 80S（分子量 4×10^6）和 40S（分子量为 1.3×10^6）的两种亚基组成。60S 亚基的分子量为 2.7×10^6，含有 28S、7S 和 5S 三种 RNA，

40S 亚基含一种 18SRNA。两个亚基大约共计 60% RNA、40% 蛋白质。60S 和 40S 亚基分别含有 40 种和 30 种分子量比较低的蛋白质，并含有 23S 和 5S 两种 RNA。30S 亚基由 21 种蛋白质和 16SRNA 组成。蛋白质生物合成时、mRNA 结合核糖体的 40S 或 30S 亚基、tRNA 以反密码子部位在 mRNA 氨基酸结合部位与 60S 或 50S 亚基相结合。TRNA 在每个核糖体上的结合部位有两个，称为 P 部位和 A 部位。

核武器放射分析法诊断 radioanalytical diagnosis of nuclear weapons 通过用放射化学方法分析核爆炸产物以判断核武器性能。诊断的内容包括总裂变威力、分裂变威力、聚变威力和特定核反应。分析所用样品取决于核武器的爆炸方式、大气层试验采集气溶胶和爆炸碎片，地下核试验采集爆心附近的熔岩（玻璃体）和空腔泄漏气体。

核自旋 nuclear spin 原子核由质子、中子组成，带正电荷，具有一定质量，并具有自旋现象，具有磁矩。描述核自旋运动固有特性的是核的自旋量子数 I。不同核素具有不同的 I 值。凡 $I\neq0$ 的核，在外加静磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中，核磁矩受到力矩作用，像陀螺似地绕 $\boldsymbol{B}_0$ 作旋进运动（拉摩进动），并且原来简并的核自旋能级便分裂成 $(2I+1)$ 个分立的能级，称为核的塞曼能级。能级的高低由核自旋磁量子数 M_I（其取值为 $M_I=I,\ I-1,\ \cdots,\ -I$）决定。

核自旋的自扩散 self-diffusion of nuclear spin 样品内部分子的扩散作用及磁场不均匀性的作用使核自旋从样品中某一位置移到另一位置，对于同种核素之间的扩散称为自扩散过程。因此自旋回波的幅度应考虑自扩散导致的衰减，它与磁场在样品处的梯度 G、核的磁旋比 γ、体系的扩散系数 D 与脉冲的间隔 τ 有关。在 2τ 时刻的回波幅度正比于自旋-自旋弛豫作用与自扩散作用二项的叠加 $\exp\left(\frac{-2\tau}{T_2}\right)\exp\left(\frac{-2\gamma^2G^2D\tau^3}{3}\right)$。

核自旋角动量 nuclear spin angular momentum 原子核自旋运动所产生的动量矩，以 $\boldsymbol{P}$ 表示。其绝对值取决于核自旋量核子数 I

$$|\boldsymbol{P}|=\sqrt{I(I+1)}\hbar，其中\ \hbar=\frac{h}{2\pi}。$$

核自旋量子数 nuclear spin quantum number 表征原子核自旋运动特性的基本物理量，以 I 表示。原子核由质子、中子等基本粒子组成，质子和中子都有自旋运动。不同核素的自旋运动不尽相同。由核自旋量子数 I 来描述。可将核分成三类：凡其质子数 Z 与中子数 N 都是偶数时，$I=0$，如 ${}^{12}_{6}C$、${}^{16}_{8}O$、…；凡 $Z+N$ 为奇数时，I 为半整数。如 ${}^{1}_{1}H$、${}^{13}_{6}C$、${}^{31}_{15}P$、…$\left(I=\frac{1}{2}\right)$，${}^{23}_{11}Na\left(I=\frac{3}{2}\right)$，${}^{17}_{8}O\left(I=\frac{5}{2}\right)$，…；凡 Z 与 N 皆为奇数时，I 为正整数，如 ${}^{2}_{1}H$、${}^{14}_{7}N$、…$(I=1)$，${}^{10}_{5}B$、…$(I=3)$，…。

核自旋能级上的布居数 population on nuclear spin energy levels 见**布居数**条。

核自旋体系的表示法与分类 notation and classification of nuclear spin system 分子中所含的磁性核相互之间存在着自旋-自旋耦合者将组成-组核自旋体系。规定用如下符号表示它们所组成的体系：（1）分子中同种核素的不等同核，其化学位移与它们彼此间的耦合常数的大小同数量级者，以紧挨的英文字母 A，B，C，…表示之。（2）若有以上核体系两组，它们之间的化学位移差别 $\Delta\delta$ 与它们之间的耦合常数 J 之比大于 6，则这两组核体系表示成 ABC…XYZ。（3）若有这样的 3 组核体系则表示为 ABC… LMN … XYZ，依次类推。化学位移相差甚大的二核体系取英文字母顺序中两头字母表示成 AX 体系；相差居中的体系中，化学位移较靠近者，可用字母 AM 或仍以 AX 来表示体系，很接近者写为 AB 体系。（4）分子中磁性等同核，以同一字母表示之，而字母右下角标数字指示磁等同核的数目。（5）分子中化学位移等同的核，但并非磁等同核，则用一字母但右上角加一撇来表示。若有 3 个这样的核则第二个核右上角标加两撇来表示，依次类推。由此 CH_2 ═CClBr 中两个氢为 AB 体；CH_2 ═CFCl 中两个氢与一个氟构成 ABX 体系；CH_2 ═CHB_2 的 3 个氢构成 ABC 体系，等等。

荷电参照 charge reference 样品组分或外加元素的标准谱线能量，可用来校正稳态荷电效应。在 XPS 分析中，由于样品不导电经常会出现样品的荷电现象，使得光电子的结合能升高。为了获得元素正确的结合能值，必须对样品进行荷电校正，常用污染碳的 C 1s（284.8eV）作为荷电参照线。

荷电效应 charge effect 非导电样品表面受 X 射线辐照后，由于光电子的连续出射而样品得不到足够的电子补充致使样品表面区域出现的电子"亏损"现象。荷电效应使样品表面带正电荷，并使测定的结合能值偏高。荷电效应在 XPS 分析中非常普遍，一般情况下可以通过适当手段如加中和电子枪等方式降低荷电效应，但要彻底消除荷电效应则比较困难，因此在大多数情况下利用参照物质进行荷电校准。

赫尔希池检测器 Hersch cell detector 一种专用于测定氧的气相色谱检测器。由银阴极和铅阳极组成，两极与含有 OH^- 离子的电解质接触，氧在阴极被还原，产生电流，有信号输出。由于对氧的检测具有特殊的选择性，因此，分析氩、氧混合物或其他混合气体中的氧时，不必对混合物进行分离，对氧的检测灵敏度接近于氦电离检测器。

黑度 density 在感光板上谱线影像变黑的程度，用 S 表示

$$S = \log \frac{i_o}{i} = -\log T$$

式中，i_o 是感光板上谱线附近透明部

分的透射光强；i 是谱线变黑部分透射光强；T 是谱线处的透过率。

黑度计 nigrometer 又称测微光度计（microphotometer）。用来测量感光板上所记录的谱线黑度，主要用于光谱定量分析。黑度计分为读数式、记录式和电算式三类，国内现主要以读数式为主。它的作用原理是：由仪器中的照明灯泡射出的光束经过聚光后，透过谱片上被测量的谱线，落在光电池上，产生光电流，此光电流由悬镜检流计测量。悬镜偏转的大小与光电流成正比，而光电流又与透过谱线的光强度成正比。因此黑度计可以通过这样的测量而求得谱线的透过率，进而转换成谱线的黑度。一般的测微光度计能直接读出谱线黑度。

黑色分析体系 black analysis system 分析对象内部特性和信息未知的分析体系。

黑体 black body 能在任何温度下全部吸收外来电磁辐射、毫无反射和透射的物体，因而在任何波长光照射下都呈现黑色。黑体是理想化的模型，自然界中并不存在，但人工制造的空腔黑体的性能可以很接近理想黑体。黑体是辐射的绝好吸收体，同时又是一个绝好的辐射发射体。

痕量分析 trace analysis 根据试样中被测组分含量常将分析方法分类为"常量（>1%）"，"微量（0.1% ~ 1%）"，或"痕量（<0.1%）"分析。百万分之几组分的分析可称为"超痕量"分析。但这样的分类并无明确的界限，属于习惯上分类。

痕量与残留物的监测方式 monitoring method of trace residues 含量在 $10^{-6} \sim 10^{-9}$ 级的成分，如各种环境样品中的微量元素及农药和毒物，它们的主要监测方法有：活化分析、原子发射光谱分析、原子吸收和原子荧光光谱分析、X 射线荧光光谱和 X 射线激发光学发光光谱分析、色谱分析、质谱分析、色质联用分析、液相色谱分析、分子光谱分析和电化学分析等。

痕量元素形态分析 species analysis of trace elements 泛指环境科学、生命科学及土壤学和地球化学中有关的痕量元素存在形式的确定。所谓形态指物种、状态或存在形式。进行形态分析时，首先应按不同的分析要求将形态分类；进而根据各形态的特征，分离和测定的复杂程度确定形态分析的层次；最后对各物种作分子水平的测定。

恒流泵 constant flow pump 色谱仪上使用的能提供恒定出口流量的高压输液泵。当体系阻力变化时，则柱前压自动增加或减小以维持流量恒定。恒流泵的压力对操作条件的变化敏感，而流量较为稳定。对液相色谱分析来说，输液泵的流量稳定性更为重要，这是因为流速的变化会引起溶质的保留值的变化，而保留值是色谱定性的主要依据之一，因此，恒流泵的应用更广泛。

恒偏向角光谱棱镜 spectral prisms with constant deviation angle 在棱镜式光谱仪器设计和使用时，往往希望在色散棱镜前、后的入射光与出射光

之间的夹角保持恒定不变，在不同波长工作时只需转动棱镜而准直物镜筒和光谱聚焦物镜筒（包括附在其上的入射狭缝、出射狭缝、光谱感光版或探测器）都不必转动。为了达到这种恒偏向角的要求，设计制造了多种恒偏向角光谱棱镜。例如立特罗（Littrow）棱镜，其长直角面上镀有反射膜，色散后的光逆入射光方向射出（偏向角恒为180°）；由三块棱镜胶合而成的阿贝（Abbe）90°恒偏向角棱镜是棱镜摄谱仪最常用的；由一块等腰三角形棱镜与一块平面镜组合成的瓦茨沃斯（Wadsworth）恒偏向角色散棱镜组，只要适当变化反射镜面与棱镜顶角平分面之间的夹角 ϕ，则不论什么波长时出射光与入射光之间的偏角恒为 $\theta = 180° - 2\phi$，这是圆盘式棱镜单色仪采用的系统。

恒温操作 constant temperature method 在一次色谱分析周期内，色谱柱的温度自始至终保持在同一个温度上。这种操作的优点是操作简便，基线易稳定，重现性好，分析周期较短，适宜分析沸程较窄的样品。对于沸程较宽的样品须采用程序升温的操作方式。参见**程序升温操作**条。

恒压泵 constant pressure pump 色谱仪上使用的能提供恒定出口压力的高压输液泵。当色谱体系的阻力变化时，则流量自动增加或减小以维持恒定出口压力。恒压泵的流量对操作条件的变化敏感，而压力较为稳定。

横模 single-mode 它代表的是光波电场在垂直于传播方向的横截面内的稳定分布，即光束截面上的光强分布和光斑花样。若把激光器输出的光束投射到白屏幕上，当调节谐振腔的发射镜的距离和角度时，在屏幕上会产生不同的光斑。按光斑的对称性可将横模分为轴对称横模和旋转对称横模。横模的常用符号为 TEM_{mn}，其中 TEM_{00} 被称为基模。

横向弛豫 transverse relaxation 见**自旋-自旋弛豫**条。

横向弛豫时间 traverse relaxation time 一个自旋体系的横向磁化矢量恢复到零需要一定的时间，一般按指数规律衰减。为了表征该横向弛豫（亦称自旋-自旋弛豫）过程的快慢，通常以 T_2（横向磁化矢量衰减到了初始值的 1/e 所需时间）来表示横向弛豫时间（亦称自旋-自旋弛豫时间），其量纲是秒。固体中晶格位置固定，有利于自旋间的能量的交换，所以 T_2 特别小，黏度较大的液体的 T_2 值也较小。对于自旋体系来说，一般均有横向弛豫时间小于纵向弛豫时间。参见**自旋-自旋弛豫**条。

横向加热石墨原子化器 transverse heating graphite atomizer; THGA 沿石墨管垂直方向加热的原子化装置。采用的组合式石墨炉依靠辐射热加热原子化器，炉内的温度梯度大幅度减少，恒温区大幅度扩大，有效地克服了通用的纵向加热的 Masamann 炉的时间、空间不等温性，提供了良好的原子化环境。其优点是：（1）炉内温度分布均匀；（2）原子化温度普遍降低，提高了原子化效率，改善了

吸收线峰形；（3）有效地减弱和消除了基体影响和记忆效应以及化学干扰；（4）延长了石墨炉的寿命。

横向加热纵向塞曼原子吸收分光光度计 transverse heating-logni tudinal Zeeman effect atomic absorption spectrophotometer 采用横向加热原子化器和纵向塞曼扣背景装置的新型原子吸收光谱仪器。1990 年美国 Perkin-Elmer 公司推出了世界上第一台 PE4100ZL 型横向加热纵向磁场调制石墨炉原子吸收光谱仪器，它靠辐射热加热试样，提供了时间、空间等温的最佳原子化条件，有效地降低和避免基体效应和记忆效应。光源发射光束方向平行于磁场，观测的是纵向塞曼效应信号，检测不到 π 组分。当不通电时，与通常的原子吸收光谱分析一样，测定灵敏度没有损失，测得的吸光度是原子吸收和背景吸收两者之和；当通电时，共振吸收线分裂为 $\sigma^{\pm}$ 组分，共振发射线位于 σ^- 与 σ^+ 组分波长的中间，不为分析原子所吸收而仅为背景吸收。此种调制方法的优点是免去了旋转偏振器，减少了光能量损失，能获得良好的检出限，是目前原子吸收光谱仪器中最理想的光路系统。

横坐标的变换 abscissa transform 波数 σ（cm^{-1}）和波长 λ（μm）是红外光谱横坐标常用的两种坐标单位，它们之间的关系为：$\sigma/cm^{-1}=\frac{1}{\lambda/\mu m}\times10^4$，其中，$\sigma$ 以波数为单位的红外辐射频率，λ 以微米为单位的红外辐射波长。这两种单位在傅里叶变换红外光谱仪的软件中可方便的互换。在红外谱图中，横坐标有以下 3 种表示法：（1）线性波长表示法，谱图的横坐标轴以波长（μm）为单位等间隔标度。（2）线性波数表示法，谱图的横坐标轴以波数（cm^{-1}）为单位等间隔标度。（3）非线性波数表示法，横坐标以波数表示，但不等分。其一是在中红外谱图中 2000 ~ 400cm^{-1} 区间的横坐标标尺比 4000 ~ 2000cm^{-1} 区间的标尺扩大一倍；其二是 2200 ~ 1000cm^{-1} 区间的横坐标比 4000 ~ 2200cm^{-1} 区间的标尺扩大一倍，1000 ~ 400cm^{-1} 的坐标标尺又比 2200 ~ 1000cm^{-1} 的扩大一倍。

红宝石激光器 ruby Laser 红宝石激光器是人类发明的第一种固体激光器，它的激活粒子是掺杂在 Al_2O_3 晶体中的 Cr^{3+}，输出波长为 694.3nm。

红快型感光板 red-rapid photographic plate 指天津感光胶片厂出产的光谱感光片的一种型号。其性能指标为灵敏度：50 ± 20，反衬度：1.0 ±0.2，雾翳 <0.08，感光范围在 300 ~ 700nm 之间。适用于定性分析。

红色载体 red support 气-液色谱中常用的硅藻土型载体。它是将天然硅藻土在 900℃ 以上的温度下煅烧制成，煅烧过程中形成的主要氧化物是氧化铁，使其产生了三氧化二铁特征的红色。它是以水合无定型氧化硅和

少量金属氧化物杂质为骨架,表面有密集的孔穴,孔径较小(1μm),比表面较大($4.0m^2 \cdot g^{-1}$)。由于结构紧密而机械强度较高,但由于表面存在硅醇和硅醚的结构,也具有活性作用点,因而对极性物质的分离带来影响,适用于非极性或弱极性物质的分析。

红外波段范围 infrared wave band 红外波段分为近红外、中红外和远红外区,各波段范围和能级跃迁类型如下表所示。

区域	λ/μm	σ/cm^{-1}	能级跃迁类型
近红外区	0.75 ~ 2.5	13300 ~ 4000	分子化学键振动的倍频和组合频
中红外区	2.5 ~ 25	4000 ~ 400	化学键振动的基频
远红外区	25 ~ 1000	400 ~ 10	骨架振动,转动

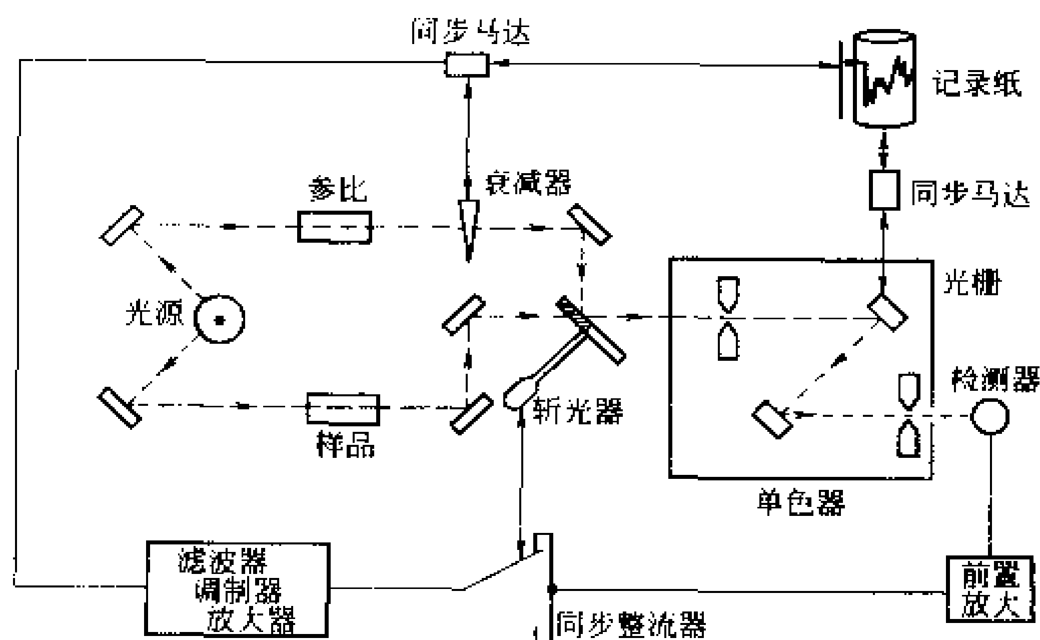
红外窗片材料 infrared window material 常用的红外窗片光学材料有硫化锌、氯化钠、氯化银、溴化铊-碘化铊、溴化钾、锗、硅、金刚石等。硫化锌常称作Irtran-2,透射范围为2~14μm ($5000 \sim 710cm^{-1}$),强度高,透明度好,耐酸、碱、水和耐高温(分解温度在800℃以上),折射率为2.2,可用作衰减全反射(ATR)晶体材料。氯化钠晶体红外光透射范围是2~16μm ($5000 \sim 625cm^{-1}$),在5μm ($2000cm^{-1}$) 处折射率为1.54。常因空气中微量水汽使晶片表面潮解而模糊,因此抛光后的晶片要保存在保干容器内。氯化银晶体红外光透射范围为2~23μm ($5000 \sim 435cm^{-1}$),不溶于水和有机溶剂,耐腐蚀,是一种特殊的红外光学窗片材料,常用作红外起偏器,ATR的反射棱镜材料的窗片材料。在红外测定制样过程中应尽量避光。溴化银的性能与氯化银十分近似,但它的使用范围可延伸到35μm ($285cm^{-1}$),折射率为2.2 (5μm, $2000cm^{-1}$处),可用作ATR的晶体材料和其他红外光学元件。溴化铊-碘化铊常称作KRS-5,是碘化铊(58%)和溴化铊(42%)的混晶,使用范围是2~40μm ($5000 \sim 250cm^{-1}$),折射率为2.37 (10μm, $1000cm^{-1}$)。不吸水,常用作检测器的窗片或水溶液样品的窗片。ATR的反射晶体元件。溴化钾晶体红外光透射范围为2~25μm ($5000 \sim 400cm^{-1}$),在5μm ($2000cm^{-1}$) 处折射率为1.56。吸湿及溶于水。充分退火后的窗片可用于高温池和低温池。锗和硅都有很高的折射率,分别为4 (10μm, $1000cm^{-1}$) 和3.4 (10μm, $1000cm^{-1}$)。都不溶于水和有机溶剂,是非常稳定的光学材料,可作为特殊研究目的的窗片材料和ATR的反射晶体材料。缺点是较脆易碎。锗在120℃以上就变为红外不透明材料。金刚石根据其在$1425 \sim 910cm^{-1}$范围是否产生强吸收谱带而分为Ⅰ型和Ⅱ型两种。这两种类型的金刚石在$2500 \sim 1660cm^{-1}$范围都有一吸收谱带,Ⅰ型金刚石还有一个$525 \sim 400cm^{-1}$的吸收峰,所以用于红外光谱的金刚石材料常选用Ⅱ型。较多用于高压体系研究工作。

红外二色性 infrared dichroism 当

利用红外偏振光测量单晶或取向高分子样品光谱时，偏振光的电矢平行和垂直于样品的某个轴向的吸收情况不一样，这种现象称为红外二色性。气体、液体的取向是无规则的，不显示二色性。电矢平行和垂直于样品的某个轴向的吸收强度之比 $R = I_{/\!/}/I_{\perp}$，称为该吸收谱带的二色比。因为振动跃迁矩与光的电矢平行时才能产生吸收，因此通过二色比的测量可确定分子中某个基团相对于分子的某个轴的取向，确定高分子取向度和空间结构。

红外发射光谱 infrared emission spectroscopy 红外发射光谱技术是指在进行发射光谱测量时，以样品本身作为发射光源，样品发出的红外光经椭球镜收集，反射到干涉仪，并到达检测器，即可获得样品的红外发射光谱。就实用目的，可分成两类：（1）实验室测量，即将发射红外辐射的待测物放在实验室内或紧靠干涉仪或者置于专用红外发射附件内；（2）红外遥感测量，即将待测物置于远距离处。对于不宜作透射光谱的体系，如物体表面、腐蚀性极强样品，远距离加热或燃烧样品可作定性定量分析。

红外分光光度计 infrared spectrophotometer 常用双光束方式，其构造原理如下图。它由红外光源，带有以棱镜或光栅为单色器的光学系统，检测器和控制记录系统组成。红外光源可采用 Nernst 灯、碳化硅棒、涂有稀土化合物的镍铬丝陶瓷电热器等，辐射光先分成等强度的两束，分别通过样品和参比池。通过参比池的光束经调节光强度之用的衰减器（光梳或光光楔）与通过样品的光束会合于切光器（一个均匀截去占二分之一面



红外分光光度计

积的两个扇形所留下的圆盘）。切光器用同步马达驱动，使这两束光交替射入转动的单色器。产生色散后的光交替射到检测器（常用热电的和光的），经放大，整流，一路光用以反馈并控制衰减器，以便达到系统光路的光学零位平衡，消除外来干扰；此时另一路便接收到转动的单色器所扫过对应的波长（或波数）的红外光的强度，记录成红外谱图。

红外分析仪器 infrared analytical instruments 在红外区利用红外线与物质的相互作用而对物质进行定性定量分析的仪器，都是红外分析仪器。在分析测试工作中除了应用最广泛的各种红外分光光度计外，红外线气体分析仪和近红外光谱仪近年来应用也日益广泛。红外线气体分析仪是专门用于测定气体成分浓度的仪器，根据被测气体对红外线的特征吸收实现对单组分或多组分混合气体的定量分析。汽车排气污染监测仪是现今常用的红外气体分析仪，可对碳氢化合物、硫氢化合物甚至氮氧化合物进行快速测定；工业流程在线红外线气体分析仪，不但可对原料、中间产物及最终产品成分进行自动连续检测，而且可与调节器、计算机系统连接，实现生产流程闭环自动控制，不但在石油、化工、电站等大生产中广泛应用，而且已在环保、农业、医疗部门推广应用。近年来迅速发展的近红外光谱分析仪器，不但可对透明试样，而且对不透明、散射试样实现准确定量分析，更可贵的特点是不要求严格的试样制备操作，甚至可直接完成在线连续分析，这是传统实验室用红外分光光度计等手段难以完成的。

红外干涉图 infrared interference pattern 见干涉图条。

红外固体样品制样法 preparation of solid-state sample for IR 红外光谱中固体样品的制样方法有溶液法、压片法、薄膜法和调糊法。溶液法是将固体样品溶于合适溶剂中，置于液体池内进行测定。压片法是将样品研成粉末，加入适量的粒度为 200～300 目纯 KBr 粉末，在研钵中研磨混匀，转移到专用的模具中在低真空下压成厚度约 1～2mm 的透明薄片。纯 KBr 在 4000～400cm^{-1} 区域无吸收，能获得样品的全部红外区的光谱。它是测定固体样品常用的一种方法。KBr 易吸水，处理一般要在 120℃ 干燥 4h 以上。薄膜法是将固体样品制成厚度适当的透明薄膜进行测定。调糊法是在研细干燥好的样品中滴入几滴悬浮剂（石蜡油），在玛瑙研钵内研成糊状，再将糊状样涂在盐片上进行红外光谱测定。参见**薄膜法**条。

红外光谱电化学法 infrared spectroelectrochemistry 红外光谱与电化学技术相结合而形成的一种研究方法。红外光谱电化学法已广泛应用于各种电化学界面过程以及机理的研究。

红外光谱分析 infrared spectroscopy 红外光谱是分子振动、转动运动所产生的，它包括了频率范围从 10000cm^{-1} 到 400cm^{-1} 直到 10cm^{-1} 的近、中、远红外光谱区。它利用物质

（分子）的吸收或发射红外光谱的能力及其光谱的固有的特征性质，包括峰位（频率）、峰形、峰宽以及峰强度等。由于所有化合物的红外光谱互异，利用光谱行为与分子结构间相互关系，可以定性地鉴别、鉴定该物质含有什么功能基团，甚至确定它是什么化合物分子，还可以定量地确定体系中所含特定物质的含量。红外光谱分析时，将所测化合物光谱同化合物标准谱进行比较，可人工，也可进行计算机谱库检索比较，来作出鉴定。对未知物则利用特定官能团、特定空间位置、氢键、螯合等所呈现光谱特殊性来确定分子内片段结构的存在。利用谱峰的相对强度可以了解体系组成的比例和进行成分的定量分析。基于此红外分析还可研究化学反应动力学，材料的晶变、相变与结构瞬变的动态过程、工艺流程与大气污染的连续在线检测。对于复杂谱图常常采用各种数据处理方法，例如导数法、去卷积分峰法、二维相关分析等提高表观分辨率，简化谱图等从而进一步获得更具体的结构信息。

红外光谱学 infrared spectroscopy 分子光谱学的一个重要分支，研究红外辐射与分子振动或转动的相互作用。根据红外辐射的不同波段，红外光谱学分为远红外光谱学、中红外光谱学及近红外光谱学。借助于色散或傅里叶变换红外分光光度计，可记录物质的红外光谱。红外光谱分为红外发射光谱与红外吸收光谱两类，应用最普遍的是红外吸收光谱。红外吸收谱带的波长位置与吸收谱带的强度反映了分子结构上的特点，根据谱带的位置和强度可用来鉴定未知物的结构组成或确定其化学基团。吸收谱带的吸收强度与分子组成或其化学基团的含量有关，可用以进行定量分析和纯度鉴定。红外光谱的特点是特征性强，每种化合物都有自身特征的红外光谱；任何气态、液态和固态样品都可进行红外光谱分析；样品用样量少；分析速度快和不破坏样品等。红外光谱可以用来表征与鉴别化合物，研究分子的结构和化学键。

红外光谱遥感分析 infrared spectrum remote-sensing analysis 见**遥感傅里叶变换红外光谱法**条。

红外光束聚光器 infrared beam condenser 将红外光束缩小的装置，通常有透射式和反射式两种。透射式一般用溴化钾透镜，使用时放在样品室内，缩小倍数为4∶1，缺点是透镜有色差，溴化钾受潮变得不透明。反射式用离轴椭圆反射镜，无球面像差，缩小倍数为6∶1。还有采用Schwatzchild式显微镜原理的红外显微镜，缩小倍数达8.5。可做纤维光谱。

红外光源 infrared source 能发射一定强度红外辐射的器件都可作为红外光源。理想的红外光源应该是高强度的可调单色辐射体。但目前实际使用的是宽谱带光源。常用的红外光源有四种：（1）能斯特光源，主要由锆和钇（或铈）的混合氧化物组成，并掺杂少量氧化钍和氧化铈。可在1800K工作，不需冷却，特点是寿命

长，体积小、效率高，除2～5μm区外，所发射的能量约为硅碳棒或镍铬丝的2倍。缺点是在室温下不导电，需预热到约800℃才开始导电。（2）硅碳棒，由碳化硅构成的棒，可在1200～1500K下工作，一般需要冷却。特点是表面发射比较均匀，长波区的能量稍高。缺点是其电阻具有负温度系数，大量功率消耗在温度最低而电阻最大的电极接头处，效率低，使用寿命短。（3）镍铬丝螺管，是用镍铬丝缠绕而成。工作温度为1200～1500K，不需冷却。优点是稳定性高，使用寿命长，在较低温度下寿命可达几年。其电阻具有正的温度系数，发射能量与硅碳棒相同。缺点是光源成像不均匀，不过这可用外套陶瓷管来弥补。（4）高压石英汞灯，在波长大于70μm的远红外区，其辐射能量超过普通的黑体辐射。在小于4.5μm的短波区，其辐射强度很低。

红外检测器 infrared detector 将红外辐射转换为可测物理量的部件。常用的红外检测器有如下3种：（1）热电偶，属于热检测器，吸光后引起温差变化，导致温差电势的改变。它适用波数范围广，使用寿命较长，可检测10^{-6}℃温度的变化。缺点是时间常数较大。中程红外光谱仪多采用此类检测器。将几支热电偶串联起来，可以提高输出电压，此即热电堆。（2）气动式检测器（Golay池），它包含有一小气室，小气室的一面壁为能吸收红外光的膜，另一面壁是柔软的镀有反射铝面的火棉胶反射镜。膜吸收辐射以后使小气室中的气体受热，压力增高，致使柔软反射镜变形，变形的程度与接受的红外辐射强度成比例。它的优点是灵敏度高，适用波段宽，线性关系好，响应速度快，缺点是火棉胶反射镜易老化。多用于远红外区。（3）光子检测器，如TGS光子检测器，由三甘氨酸硫酸酯晶体制成。受红外光辐照后，其介电常数改变。它的特点是响应速度快，噪声影响小，用于快速扫描的光谱仪中。

红外偏振光谱 infrared polarization spectrum 见**偏振红外光技术**条。

红外偏振器 infrared polarizer 作用是将普通红外光源产生的自然光进行偏振后而得到偏振红外光。偏振器有两种。（1）电介质偏振器：其原理是基于以下光学现象，当自然光照射到任何一电介质或晶体（如玻璃、石英等）表面时，所反射的光是偏振的，其电矢量与反射平面平行，与入射面垂直；（2）线栅偏振器是由许多相互平行的金属线组成的栅状薄膜，当两金属线的间距（光栅常数）小于1/4入射光波长时，入射光中只有电矢量方向垂直于光栅狭缝的光可以全部通过，而电矢量平行于光栅狭缝的光会被全部反射，这就是线栅偏振器的原理。如今线栅偏振器已经取代了电介质偏振器。

红外谱图解析 infrared spectrum analysis 见**光谱的解析方法**条。

红外溶剂 infrared solvent 用于红外分光光度分析的溶剂。对其要求

是：对样品应有足够的溶解能力，且不与样品起化学反应；溶剂与样品间亦无强烈的相互作用，最好是非极性的溶剂；在所研究的波段范围内不产生吸收或吸收较弱。四氯化碳与二硫化碳是经常使用的红外溶剂。在吸收池厚度为0.1～0.2mm情况下，四氯化碳可用于4000～1330cm^{-1}；二硫化碳可用于1330～450cm^{-1}。

红外吸收池 infrared absorption cell 红外光谱仪中盛装液体样品的小容器。对吸收池材料的要求有透光的波长范围、透光能力、机械强度、加工性能、毒性，以及对热、光、水和化学物质的稳定性。有气体吸收池和液体吸收池。前者分普通气体池，加压气体池和长光程气体吸收池。由于气体中单位体积内的分子数比液体中少几个数量级，吸收强度低。为了增加光路中的分子数，可以加压，亦可用多次反射来实现。目前市售的长光程气体池已达40m。液体吸收池分为可拆卸式吸收池，固定式密封吸收池，可变长度吸收池，微量和超微量吸收池（可达0.1μl）。此外还有高温和低温吸收池。

红外吸收谱带 infrared absorption band 在光吸收过程中，随着振动跃迁的发生，伴随着转动跃迁所形成一组靠近的谱线组。溶液中由于分子间的相互作用，气体中因碰撞变宽和多普勒变宽等因素的影响，致使靠近的线不能分辨开，形成具有一定波数宽度的带状光谱，即吸收谱带。根据吸收谱带可对物质进行成分、官能团的鉴定和结构分析。

红外吸收谱的三要素 three factors of infrared absorption spectrum 指红外吸收谱带的位置、强度和峰形。它们对解析红外光谱都很重要。在确定化合物分子结构时，必须将吸收峰位置辅以吸收峰强度和峰形来综合分析。只有当吸收峰的位置及强度都处于一定范围时，才能准确地推断出某官能团的存在。以羰基为例，如果在1680～1780cm^{-1}有吸收峰，但其强度低，这并不表明所研究的化合物存在有羰基，只表明该化合物中存在羰基化合物的杂质。吸收峰的形状也决定于官能团的种类，从峰形可辅助判断官能团。以缔合羟基、缔合伯胺基及炔氢为例，其吸收峰位置略有差别，但主要差别在于吸收峰形不一样：缔合羟基峰圆滑而钝；缔合伯胺基吸收峰有一个或小或大的分岔；炔氢则显示尖锐的峰形。

红外吸收强度 infrared absorption intensity 红外吸收强度决定于振动时偶极矩变化的大小。基团极性越大，吸收谱带越强。羰基特征峰在红外谱峰总是最强的谱峰之一，而两端取代基差别不大的碳-碳键的红外吸收则较弱。吸收谱带强度可用摩尔吸收系数、吸光度、透光率和吸收率来衡量。

红外显微镜 infrared microscope 见傅里叶变换显微红外光谱条。

红外总吸光度重建色谱图 total infrared absorbance reconstruction chromatogram 重建色谱图的一种。它与

化学图有一定相似之处，即色谱峰的响应值是相应时刻的干涉图变换成红外光谱图后，全波数范围（或部分波数范围）的红外吸光度的积分。其图上各化合物的响应强度是该化合物红外总吸光度，能较全面反映色谱流出情况。缺点是信噪比低。参见**重建色谱图**条。

红细胞电泳时间测定 determination of red cell electrophoresis time 在电场中，表面带负电荷的红细胞向正极方向移动。红细胞的测定是通过某一规定距离所需要的时间，称为红细胞电泳时间。该时间的延长和缩短表示红细胞聚集性的增高或降低，反映血液的流变状态。正常参考值为14.6～18.2s。

红细胞叶酸测定 red cell folate assay 测定叶酸方法之一。正常1ml红细胞内含叶酸量100～600pg。巨幼红细胞贫血时其叶酸含量下降，下降程度与贫血的程度呈正比。本法不如血清叶酸测定敏感。

红移 red shift 由于使用不同的溶剂或引入取代基所引起的化合物的光谱（紫外-可见吸收或荧光等）的吸收峰向长波长方向移动的现象。其机理可由跃迁能级的变化来阐明。例如，当化合物溶于极性溶剂时，会产生溶剂化作用，由于激发态和基态的电荷分布不同而使这两种状态的溶剂化程度不同。溶剂的极性愈大，有机分子的成键π轨道向反键π*轨道的跃迁能愈小，即激发态的极性大于基态，能级降低比基态大，从而光谱发生红移。

红油的快速鉴定 rapid determine of red fuel 所谓红油实际上是香港地区对工业专用柴油的一种俗称，是在普通柴油中加入染料醌茜，使其颜色从浅黄色变为清亮的红色，所以被称为红油。由于这类柴油在香港是免税油品，故其价格低于普通柴油。我国从未批准“红油”进口，海关等部门要求出入境检验检疫局定性样品是否是香港“红油”，以便确认是否为走私。定性鉴定柴油中是否有醌茜的方法是，在样品中加NaOH和正丁醇，经振荡并分层后，在下层水相中有紫色者，就可判定含有醌茜。该定性方法检出限>$0.35mg \cdot L^{-1}$醌茜。醌茜的定量方法是，经NaOH和正丁醇萃取分离后，将水相在594nm处测定吸光度。该方法也可以测定$0.35mg \cdot L^{-1}$醌茜。

宏观磁化强度矢量 macroscopic magnetization vector 核自旋量子数I非零的核在静磁场B_0中分裂为$(2I+1)$个能级。按波耳兹曼分布这$(2I+1)$能级上的磁矩μ_i分别在以B_0方向为对称轴的相应的圆锥面上作进动。由于顺着磁场方向的圆锥面上进动的核数略多于逆磁场方向进动的核数，热平衡时存在着总的顺着磁场方向一个宏观的磁化矢量M。单位体积内该体系所有N个核磁矩μ_i的矢量和$M=\sum_{i=1}^{N}\mu_i$。M简称为磁化强度矢量或磁化矢量。

后沉淀 post-precipitation 当主要

沉淀反应已经完成，沉淀与母液一起放置时，母液中某种本难以形成沉淀，或是能形成稳定过饱和溶液而不能单独形成沉淀的物质随后也沉淀下来的现象。后沉淀使最初沉淀的物质严重玷污，且随沉淀放置时间的延长而玷污程度增大。

后脉冲 post pulse 在电子联机放大期间产生的正离子回到阴极或前级打拿极并引发出一个二次电子脉冲的现象。由于此二次脉冲跟随第一个脉冲，使得整个的脉冲会持续几百纳秒，会在相关函数上出现峰值，因此采用低后脉冲速率的管子是从根源上消除后脉冲的最好途径。

后向散射 back scattering 受激拉曼散射光传播的一种方式，它沿着与泵浦光入射方向相反的方向传播。

后行反应 following reaction 化学反应后行于电极反应、电极反应的产物紧接着参加化学反应。

呼吸发光 respiration chemiluminescence 生物体在呼吸过程中自发发射光子的现象。Willims 等曾用单光子测量技术监测到人在呼吸过程中能自发地发射 700 光子 · 升$^{-1}$。这是由于空气中存在的氧自由基等活性基团能自发发射红光的缘故。由于烟中含有多种活性物质，所以有人发现抽雪茄烟的人其呼吸发光比正常人高。

呼吸振动 breathing vibration 见**骨架振动**条。

弧焰稳定剂 arc flame stabilizing agent 其作用主要是稳定光源的蒸发、激发温度，以减小或消除试样组成的影响。常用的稳定剂有氯化钠、碳酸钠等，它们都具有低电离电位和低沸点。

互补色 complementary colors 能够混合产生白色或灰色的两种颜色，称为互补色，例如黄—蓝、红—绿。在可见的红、橙、黄、绿、青、蓝、紫等纯色在圆周上依次排列而成的颜色环上，白色位于圆环中心，与圆心相对直径两端的环上两点代表的两种颜色都是互补色。一对互补色可在适当的比例下混合成白色或灰色，比例不适当时则得到接近其中某一种颜色的不饱和（不纯）色。

互不相容规则 rule of mutual exclusion 在光谱选律中，在具有中心对称的分子中，振动跃迁中为红外允许的（红外活性），则不为拉曼允许（为拉曼非活性），反之亦然。此称互不相容规则。

互易律失效 reciprocity-law failure 落在感光板上的曝光量 H 是由照度 E 与曝光时间 t 所决定，即 $H = Et$。但事实上，若有两个不同的照度 E_1 及 E_2，作用的曝光时间分别为 t_1 及 t_2，而 $E_1t_1 = E_2t_2$，但感光板产生的黑度并不一样，此称感光板的互易律失效。为了避免这种效应的影响，制作乳剂特性曲线时，曝光时间应与分析时的摄谱曝光时间相同或相近。

滑移面 glide plane 进行滑移对称操作的对称元素。滑移对称操作是反映操作与沿平行于对称面的方向作平移操作的复合对称操作。如果复合

对称操作中的平移操作是沿晶体学 a 轴方向施行的，称之为 a 滑移面，同理沿 b 方向施行的称为 b 滑移面，沿 c 方向施行的称为 c 滑移面。如果滑移面的复合操作中，平移操作是沿着与对称面平行的两个晶轴的对角线方向施行的，就是 n 滑移面或 d 滑移面。在 a 滑移面、b 滑移面、c 滑移面和 n 滑移面的平移对称操作中，平移量是所指定方向上基本周期的一半，而在 d 滑移面的平移对称操作中，平移量是所指定方向上基本周期的1/4。

化合物形成色谱 compound-formation chromatography 基于固定相表面化合物的形成与分解过程的色谱方法。例如，亲和色谱就是一种化合物形成色谱。

化探样品 geochemical prospecting sample 用于化探分析的样品称为化探样品。化探分析是地球化学勘查中采用的能够有效地发现，强化和评价地球化学异常的分析方法。早期的分析方法以半定量光谱分析和比色分析为主要手段。自 20 世纪 60 年代以来，新的选择性和灵敏试剂、新的分析方法和新的高精密度自动化分析仪器不断地应用到化探分析领域。

化学等同核与化学等价 chemical equivalent nuclei and chemical equivalence 分子通过点群对称操作可使分子内部一些核互换位置，并使整个分子复元的一组同种核为化学等同核。在 NMR 中由于分子内一些基团可快速旋转，使基团上的同种核的行为平均化，这种核化学等价也称为化学等同核。一般地说，化学等价的核具有相同的化学位移。因为偶然的原因而化学位移相同的核也称为化学等价（等同）核。

化学电离 chemical ionization 质谱法常用的一种电离方式。其原理是：首先使反应气电离，由电离的反应气离子与被分析物分子发生分子-离子反应，从而使被分析物离子化。从化学电离的条件分，有低压（<0.1Pa）化学电离、中压（1～2000Pa）化学电离和大气压化学电离。从化学反应的类型分，有正化学电离和负化学电离。正化学电离发生的分子-离子反应主要有质子转移反应、电荷交换反应、亲电加成反应；负化学电离发生的分子-离子反应主要有电子捕获反应、负离子加成反应等。

化学电离（离子）源 chemical ionization source 一种常用的质谱仪离子源，利用化学电离的原理使样品发生电离的装置。目前特指在真空下产生化学电离的装置。它的结构与电子电离源类似，只是化学电离的电离室有较好的密封性，使室内反应气可以达到离子-分子反应所需的压强。它是一种软电离技术，利用电子束先使反应气体（甲烷、异丁烷等）电离，生成反应气离子，后者再和样品分子碰撞，进行离子-分子反应，得到比样品分子大或小一定质量（具体数值大小与反应气体有关）的准分子离子，由准分子离子可以推测

分子量。

化学发光 chemiluminescence 俗称冷光。指通过化学反应而产生的发光现象：物质分子吸收化学反应产生的能量后跃迁至激发态，当其回到基态时以光的形式辐射能量。化学发光现象较早发现于生物体，如萤火虫和一些海洋生物中，普通有机物的化学发光现象于1871年由Radziszewski在研究洛粉碱与过氧化氢的反应时发现。20世纪50年代后化学发光现象在分析化学中获得广泛应用，化学发光分析的主要特点是灵敏度高和测量装置简单。

化学发光标记 chemiluminescence label 将一种化学发光效率较高的发光试剂用有机合成的方法以共价键形式与被标记物偶联，使被标记物具有了化学发光能力，因此可利用化学发光检测技术将其灵敏地检出。常用的化学发光标记剂有鲁米诺、ABEI、吖啶酯、萤火虫荧光素等。标记技术分碳二亚胺缩合法、过碘酸钠法、戊二醛法混合酸酐法和重氮化法等。

化学发光传感器 chemiluminescence sensor 一种基于化学发光反应和测量原理的传感器。这种传感器通常由两部分组成，一是感应器，由对被测物具有高度选择性的分子识别功能膜构成，二是转换器，将在膜上进行化学发光反应而产生的化学发光信号转变为电信号，最后经处理，在仪器上显示记录下来。

化学发光反应动力学曲线 chemiluminescence reaction kinetic curve 化学发光强度随时间变化的曲线。它表征化学发光反应的速度。由于许多化学发光反应呈现快速的动力学特性，因此在化学发光检测装置的设计中要求具有高度重现的试剂混合方式，以保证足够的测量精密度。

化学发光剂 chemiluminescence reagent 指反应中其产物（或反应物）能吸收反应的化学能而产生化学发光的试剂，或能将能量传递给体系中共存的其他荧光物质，使后者产生化学发光的试剂。前者的典型例子是鲁米诺，其反应产物氨基邻苯二甲酸根离子吸收反应的化学能而被激发，回到基态时发射光子；后者的典型例子是过氧草酰酯TCPO［双-(2,4,6-三氯苯基）草酰酯］，其反应产物是处于激发态的1，2-二氧杂环丁二酮（Ⅱ），其本身并不发光，而是将能量转移给某一荧光化合物，后者产生化学发光。

化学发光检测器 chemiluminescence detector 一种选择性很高的检测器，基于化学反应产生的发光现象的原理设计而成。常用于含硫、含氮化合物的测定，以测硫的化学发光检测器为例，其机理为含硫化合物经化学反应产生的SO，再与臭氧进行第二步反应，产生的发射光通过滤光片由光电倍增管接收信号，这是硫的选择信号，产生的光强度与溶质的浓度成正比。化学发光检测器灵敏度高，最小检测量可达皮克级。

化学发光量子产率 chemiluminescence

cence quantum yield 化学发光量子产率（Φ_{CL}）定义为产生化学发光的分子数与参加化学发光反应的总分子数的比值，由下式表示。

$$\Phi_{CL}=\frac{\text{发光的分子数}}{\text{参加反应的分子数}}$$

化学发光免疫分析 chemiluminescence immunoassay 利用能参与化学发光反应的试剂标记抗原或抗体，并利用化学发光检测技术进行免疫分析的一种技术。标记物可以是发光剂如鲁米诺，ABEI 等，其被氧化后产生强烈的化学发光。亦可是催化剂如辣根过氧化物酶等，其能够参与催化某一化学发光反应而产生化学发光。若标记物自身不参与化学反应，但是能通过能量转移过程，吸收化学反应产生的化学能而被激发并发射光子，则亦属此类分析技术。这种方法兼具化学发光分析的高灵敏度和免疫分析的专一性的优点，是一种超微量的分析方法，能分析 $10^{-12} \sim 10^{-15}\,\mathrm{mol \cdot L^{-1}}$ 的生物样品。

化学发光探针 chemiluminescence probe 被化学发光试剂标记的化合物称为化学发光探针。这种探针仍具有化学发光的特性。

化学发光体系 chemiluminescence system 以参与化学发光反应的化学发光剂来进行分类，每种类型在习惯上被称为一种化学发光体系。例如，鲁米诺化学发光体系指有鲁米诺参与的一类反应的总称。常见的还有光泽精化学发光体系、洛酚碱化学发光体系、过氧化草酸盐化学发光体系、萤火虫荧光素化学发光体系等。

化学发光效率 chemiluminescence efficiency 亦称为化学发光量子产率。参见**化学发光量子产率**条。

化学发光增强剂 chemiluminescence enhancer 加入到化学发光反应体系中使化学发光强度大大增强的试剂。其作用机理尚不清楚，可能是因为它的加入使产生激发态产物的效率增大，或由于溶液微环境的变化阻止了激发态的猝灭。最常用的化学发光增强剂是表面活性剂。如吖啶衍生物在胶束中与氧反应可以产生较强的化学发光，而在水溶液中检测不到发光信号。此外，对碘苯酚等化合物可大大增强过氧化物酶催化鲁米诺的化学发光强度，被广泛用于化学发光免疫分析中。

化学分析 chemical analysis 基于物质的化学反应对试样进行定性或定量分析。化学定性分析主要涉及各种系统（形成硫化物、氢氧化物和碳酸盐等）分析法和特效试剂分析法；定量分析主要有重量分析法和滴定分析法。

化学分析用电子能谱 electron spectroscopy for chemical analysis；ESCA 即 X 射线光电子能谱。该名字是 XPS 的通俗说法，现在常用的名称是 X 射线光电子能谱。

化学干扰 chemical interference 在溶液或气相中被测元素与其他组分之间的化学反应而引起的被测元素分析信号的变化。它是一种选择性干扰，不仅取决于被测元素和干扰元素

的性质，还与实验条件（火焰类型、温度、氧化还原特性、火焰高度，石墨炉温度、升温速率等）有密切关系。它既可以增强分析信号，亦可能降低分析信号，通常将前者称为增感，而仅将后者称为干扰。化学干扰的原因很复杂，如被测元素与干扰元素形成热力学更稳定的化合物，形成难熔氧化物、碳化物或氮化物，与基体或有机物形成易挥发性化合物，难挥发性基体包裹被测元素等。因此也没有消除化学干扰的通用方法，需视具体情况采用不同的方法，常用的方法有：使用基体改进剂、稀释剂、保护剂或缓冲剂；提高温度；化学分离；采用基体匹配的标准样品；应用标准加入法等。

化学感应动态核极化 chemical induced dynamic nuclear polarization; CIDNP 在磁场中进行的某些化学反应能观测到的核极化现象，发现于1967年。它所产生的NMR信号常比普通核欧沃豪斯效应（NOE）更强，检测的自由基的灵敏度甚至比ESR更高。这种现象可通过化学、热或光等多种方式来诱导，经诱导产生了自由基，而且对新分子形成过程中各个自由基对核的自旋态有确定的选择规律，从而引起核自旋取向的重新分布。CIDNP实验可辨别该反应体系是否属于自由基反应，是探索自由基反应的机理和动力学的有效手段。可研究反应的全过程，获得反应速率常数、活化能、自由基寿命，自由基结合的几率等信息。可作为结构化学的分析方法，测定自由基中的超精细耦合常数的数值与符号，自由的 g 因子，自由基对换作用能，自旋耦合常数的数值和符号，自由基的核弛豫时间等。可用来研究 $10^{-8} \sim 10^{-3}$s 所出现的瞬时反应，如闪光光解反应，激光生化反应等。

化学光谱法 chemical spectrometry 一种化学预分离富集与原子发射光谱法（AES）相结合的方法，是采用化学方法把待测杂质元素转变为所需的化合物形式，选择相应的方法进行预富集，然后对杂质浓缩物进行原子发射光谱法测定。常用的富集方法有挥发法、萃取法、离子交换法和沉淀法等。化学光谱法适用于广泛领域的多种样品分析。

化学火焰 chemical flame 简称火焰。由燃气与助燃气组成的可燃混合物，在一定温度下可着火燃烧产生化学反应提供能量的热源。在分析中，作为原子化热源使用的火焰，需要考虑的因素有：（1）火焰温度，直接决定了它的原子化能力，空气-乙炔火焰的温度最高可以达到2500K，近30种元素可有效原子化，氧化亚氮-乙炔火焰的最高温度可以达到2990K，可使约70种元素原子化。在火焰区内温度随火焰高度分布是不均匀的，要选择最佳火焰区，通常是内焰区进行测定。（2）燃烧速度不能过快，过快的燃烧速度要求更高的供气速度，否则会产生回火，空气-乙炔火焰和氧化亚氮-乙炔火焰的燃烧速度约为160cm · s^{-1}。（3）透射性

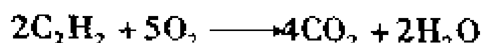
能，直接限制了它的所能应用的波长范围，有机烃类火焰在 <220nm 的短波紫外区有较强的吸收。(4)氧化还原特性，直接影响原子化效率，通常使用稍许富燃的还原性火焰进行测定。

化学激活效率 chemical excitation efficiency 任何一个化学发光反应都包括两个关键步骤，即化学激活和发光过程。化学激活效率指在化学发光反应中因吸收化学能而被激发的分子数与参加化学发光反应的分子数的比值，用 Φ_{CE} 表示。即

$$\Phi_{CE}=\frac{\text{生成激发态的分子数}}{\text{参加反应的分子数}}$$

化学计量关系 relation of stoichiometry 化学反应中各反应物的量之间的关系。例如，反应 $M+2L=ML_2$，1mol M 与 2mol L 反应生成 1mol ML_2，则称 M 和 L 在此反应中的化学计量关系为 1∶2。

化学计量火焰 stoichiometric flame 又称中性火焰。一种燃气和助燃气的组成符合它们反应化学计量关系的火焰。例如乙炔火焰，乙炔燃烧完全时发生的化学反应是



$$2C_2H_2+5O_2\longrightarrow 4CO_2+2H_2O$$

当乙炔与氧气的含量比约为 1∶2.5（或乙炔与空气的含量比约为 1∶12.5）时，获得中性（或近似中性）的火焰。化学计量火焰的特点是温度高、背景低和噪声小。

化学计量学 chemometrics 又称化学统计学。是化学与数学、计算机科学相结合而形成的边缘交叉学科。这一名词是瑞典 Umea 大学的沃尔德（S. Wold）于 1971 年首次提出。其任务是研究有关化学测量的理论与方法学、应用数学、统计学与信息理论、计算机科学的方法和手段，科学地设计化学实验，选择最优的测量方法，最有效地获取体系有用的特征数据，并通过解析测量数据最大限度地从中提取有关物质的定性、定量、形态、结构等信息。它是一门正在发展的新兴学科，其主要研究内容包括统计学与统计方法、校正理论、模型和参数估计、实验设计和优化方法、分析信号处理、化学模式识别、定量构效关系、人工智能和专家系统、软件和库检索等。

化学键合固定相 bonded stationary phase 简称化学键合相。是指固定液分子与载体表面的特定基团（例如硅胶基质表面上的硅羟基 Si—OH）经过化学反应，以化学键的形式相连而形成的固定相。键合反应之后，固定液在载体表面形成均一的牢固的单分子层或多分子层，提高了液相的传质速率，因而在实际操作中可以采用较高的流速，而不会导致柱效的明显变化。化学键合相比较牢固，大大降低了由于温度或溶剂作用而造成的流失，有助于减小检测器的本底噪声，提高检测器的灵敏度。参见流失条。

化学键合相色谱 bonded phase chromatography 又称键合相色谱或化学键合固定相色谱。指采用键合固定相的液相色谱方法，它是目前应用最广泛的液相色谱方法。

化学交换 chemical exchange 在

分子内或分子间有氢键、或有配合物的形成、流变（fluxional）分子的平衡、分子构象的平衡等情况中，由于分子内或分子间基团的重排旋转导致被观测核的位置发生交换，这现象称为化学交换、核磁共振谱谱峰位与峰形直接反映了这种交换过程的进行和交换的快慢。一个体系的交换速率常常随温度有很大变化。在低温时处于慢交换，而在高温时则可处于快交换。有的体系随着 pH 值而变化。利用变温实验或改变体系的 pH 值的实验可以了解体系中有关分子之间的相互作用以及它们所处的状态。涉及到复杂耦合体系的多位的化学交换问题的处理应用量子力学的密度矩阵的方法。考虑给定核在 A、B 两个位置间的交换。它们的共振频率分别为 ν_A 与 ν_B，随意取 $\nu_A > \nu_B$ 且出现几率相等，即核在 A、B 位置上的寿命 τ 相同：$\tau_a = \tau_b = 2\tau$。当取与核进动方向一致，以旋转频率为 $\nu_0 = \frac{(\nu_A + \nu_B)}{2}$ 的旋转坐标系看来，核在 A 位的进动频率为 $\nu_A - \nu_0$，B 位的进动频率为 $\nu_B - \nu_0$。

化学酶工程 chemical enzyme engineering 亦称为初级酶工程（primary enzyme engineering）。由酶学与化学工程技术相互结合而形成，即通过化学修饰，固定化处理，甚至通过化学合成法等手段，改善酶的性质以提高催化效率及降低成本。它包括自然酶、化学修饰酶、固定酶及化学人工酶的研究和应用。

化学平衡 chemical equilibrium 系统组成不随时间而变化的状态。化学平衡的条件是：产物的化学势等于反应物的化学势。当几种物质共存时，如果反应速率很小以致短期内检测不到化学反应发生，也可近似作为平衡处理。例如在通常情况下 H_2 和 N_2 的混合气体即可近似视为化学平衡系统。

化学色谱法 chemi-chromatography 基于化学反应差异的色谱方法。

化学势 chemical potential 体系中物质 i 的化学势定义为：当体系的温度 T、压力 p 和其余组分的摩尔数 n_j 保持不变时，向体系中加入每摩尔物质 i 时，体系的自由能 G 的变化

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,p} n_j$$

气相中的化学势为

$$\mu_i = \mu_i^{\ominus} + RT\ln\frac{p_i}{p^{\ominus}}$$

$\mu_i^{\ominus}$ 和 $p^{\ominus}$ 分别表示标准状态下的化学势与蒸气压，$p^{\ominus} = 101.325\text{kPa}$，$R$ 为气体常数。液相中

$$\mu_i = \mu_i^{\ominus} + RT\ln\alpha_i$$

α_i 为物质 i 的活度。利用化学势的高低可以判断物质在分离过程中的转移方向与限度，也可以推导出物质在两相中的分配系数。

化学态效应 chemical effect X 射线荧光光谱分析中的一种基体效应。当选用的分析谱线与待测元素的外层电子有关时，待测元素在样品中的氧化态、配位数、成键状态和其他化学态的差异，都可能影响分析谱线的波

长、峰宽以及峰形。对于轻元素，化学态效应有时是不可避免的。另一方面，利用化学态效应，研究 X 射线荧光光谱精细结构也可以提供有关元素在样品中的氧化态、配位数、成键状态等一系列有用的信息。

化学图 chemical picture GC-FTIR 联机运行中计算机按化学特性和分析的需要人为设置了"化学窗口"来采集数据的一种方式。如欲进行广谱分析时，一般要设置羟基窗口3200～3600cm^{-1}，羰基窗口 1670～1800cm^{-1}，烷基窗口 2800～3000cm^{-1}，苯环窗口 1500～1610cm^{-1}，亚甲基变形振动窗口720～850cm^{-1}等。若观察某反应过程的 C═O 变化情况，只需设置一个 C═O窗口即可。化学窗口的设置与试样组分的化学结构密切相关，化学图正是因此而得名的。从 GC-FTIR 采集的复杂试样的化学图，可大致看出试样由多少成分组成，这些成分含有哪些官能团，大致是什么类型的化合物。一般有机化合物多含有烷基，观察化学图中的烷基窗口往往可以判断 GC 出峰情况。

化学位移 chemical shift 化学位移在不同学科中有不同的具体含义。在核磁共振波谱中，化合物分子中的同种核素因所属化学基团不同，核外电子云分布不同，即化学环境不同，对核的屏蔽作用不同。当分子处于一个固定强度的外加静磁场中时，核外电子绕核的环流运动，产生了附加的磁场，导致核实际所感受到的外加的静磁感应强度是不同的，因此其核磁共振频率也就不同。同种核素因化学环境的差异而共振频率不同被称为化学位移。在不同场强的仪器下同一化学环境的某核素的共振频率值是不同的。为了统一起见，采用一个无量纲的相对差值并将它扩大 10^6 倍来表示，记以 δ。测量时选定某一化合物中该核素，比如四甲基硅烷（TMS）中的甲基氢为基准，它的共振频率为 $\nu_{标}$，化学位移值 δ 为 0。任何化合物中某^{1}H核的化学位移 δ 定义成它的共振频率 $\nu_{试}$ 与 $\nu_{标}$ 之差除以 $\nu_{标}$ 或仪器的工作频率 ν_0 再乘 10^6 之值。因此，化学位移直接提供了该核素所属的基团的种类等信息，是核磁共振所能获得的最重要的基本信息之一。在光电子能谱中，分子中某原子谱线峰值（结合能）因该原子周围化学环境的变化所引起的变化叫化学位移。常取自由原子为比较的基点。出射的光电子结合能主要由元素的种类和激发轨道所决定，但由于原子内部外层电子的屏蔽效应，芯能级轨道上的电子结合能因所处化学环境不同而有一些微小差异。通常元素获得额外电子时，化学价态为负，该元素的结合能降低。反之，当该元素失去电子时，化学价为正，结合能增加。光电子能谱的化学位移与元素的化学价态、原子的电负性差以及原子弛豫效应有关。它是光电子能谱中最常用的参量，可以用来分析元素在该物种中的化学价态和存在形式。

化学位移的标度 scale of chemical shift 磁旋比为 γ 的孤立的裸露核在

静磁场 B_0 中核磁共振频率为 $\nu=\frac{\gamma B_0}{2\pi}$。受到屏蔽 σ 的核的核磁共振频率应为 $\nu=\frac{\gamma\sigma B_0}{2\pi}$，它的真值是相对于孤立的裸露核来确定的，称为绝对化学位移。孤立的裸露核是理想化的，实际上是得不到的，因此不可能获得核的准确共振频率真值。实验中可方便地精确地测得同一种核素在两种不同化学环境中核磁共振频率的差值 $\Delta\nu$。核磁的共振频率直接与仪器的磁场强度 B_0 成正比，在说明该核的化学环境的差异时务必说明磁场强度等的大小。为统一起见，人们定义一个与磁场强度无关的相对值的形式——化学位移 δ，并以公认的某些标准（或参数）物质作为标度的起点。由于该值一般在 10^{-6} 数量级上，为方便起见，将之扩大 10^6 倍，过去并以后辍 ppm 来表示。根据 SI 单位规定，化学位移量纲应为 1，不应再加后辍 ppm。国际上已公认四甲基硅（TMS）的 ^1H、^{13}C、^{29}Si 谱峰位置，为这 3 种核素核磁共振谱中化学位移为零的标准峰。该峰左边 δ 为正，右边 δ 为负。δ 标度的零点常置于谱图的右边，化学位移从右向左渐增。

化学位移范围 range of chemical shift 核所受的屏蔽情况的差异导致化学位移的范围不同。不同核化学位移差别甚大。^1H 核外电子只处于 s 态电子，几乎不处于 p 态，因此与其他元素原子只形成 σ 键，这样 ^1H 核周围几乎只存在抗磁屏蔽项，一般不存在顺磁屏蔽项，通常 ^1H 的 δ 值范围是最窄的，约在 20 之内。包含有 p 态电子的核素中抗磁屏蔽项常常不如顺磁屏蔽项大，因此化学位移范围要宽得多，如 ^{13}C 的 δ 值范围要超过 230，^{15}N 要超过 900。包含有 d 态电子的核素则化学位移甚至更宽，如 ^{59}Co 宽达 20000，^{195}Pt 则 >18000。

化学位移各向异性 chemical shift anisotropy 自由原子（核外电子）一般产生抗磁性，对核产生抗磁屏蔽，邻近基团的电子运动会干扰指定核的核外电子的取向运动，可以表现为正屏蔽或负屏蔽（顺磁屏蔽），也就是说核外电子云产生的屏蔽效应是各向异性的。核磁的屏蔽作用是一个张量。屏蔽作用的各向异性导致了化学位移的各向异性。在液体介质中，由于分子的快速翻滚运动，分子内单键的快速旋转，又加上装有试样的核磁管快速旋转，被测分子的取向是全方位的，屏蔽张量平均化了。若液体是各向同性的，所有取向皆可能，于是屏蔽张量的平均值是它的各向同性部分，对于各个核是一简单的量 $\sigma=\frac{(\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33})}{3}$。因此化学位移各向异性未能表现出来。比较 C_2H_6，$CH_2=CH_2$，$CH\equiv CH$ 的 δ（^1H）及其存在的化学键，说明分子内不同环电子流形成的化学位移各向异性导致 $CH\equiv CH$ 共振谱线在 $CH_2=CH_2$ 的右边 3.8，在 C_2H_6 左边 0.6 处。

化学位移基准物或参照物质 standard substance or reference sub-

stance of chemical shift 核磁共振测得的化学位移都是相对位移，其值务必相对于某一参考峰而计，因此在测量时试样中应加入参考物质或基准物。所选择的参照物质或基准物的谱峰峰形要简单，单纯尖锐。测量时可采用内标（准）或外标（准）法。测量不同的核素时，需要采用各自的基准物。对于^{1}H，^{13}C，^{29}Si核皆可用四甲基硅烷（TMS），并用内标法；而^{31}P常用85%的磷酸（水溶液），并常用外标法来测定。当不便使用基准物时可以利用溶剂，包括氘代溶剂。可利用在氘代溶剂中由于氘代不完全而残留的^{1}H的NMR信号为依据，如在99.5%氘代的$CHCl_3$中的δ（^{1}H）为7.27，氘代丙酮$(CD_3)_2CO$与氘代二甲亚砜$(CD_3)_2SO$中的残留的^{1}H呈五重峰，δ（^{1}H）分别为2.05与2.50。

化学位移调制 chemical shift modulation 磁化矢量随化学位移而变化的过程。经脉冲序列作用的核自旋体系，最终检测到的体系的横向磁化强度与核间耦合常数J无关，只与核的化学位移有关。对于异核AX自旋体系（$I=\frac{1}{2}$核），脉冲列为$90°_x$（A）$-\tau-180°_x$（X）$-\tau-$采集FID，$90°_x$脉冲作用A使其与X核耦合的两个磁化分量皆由初始平衡态的z轴倒向y轴，频率为$\left(\nu_A-\frac{J}{2}\right)$与$\left(\nu_A+\frac{J}{2}\right)$的两支横向磁化矢量经$\tau$时间间隔相差为$2\pi J\tau$。随即的180°脉冲辐照X核使其$|\alpha>$态与$|\beta>$态互换，导致A核的两横向磁化矢量相互交换运动速度，再经第2个τ时间间隔，这两支磁化矢量会聚成一支，此刻检测到的横向磁化强度与J无关，只决定于A核的化学位移。

化学位移相关谱 chemical shift correlated spectroscopy 磁性核之间通过标量耦合作用而建立起来的共振频率之间的相互关系的谱。分为同核相关谱与异核相关谱两大类。同核相关谱最重要的是$^{1}H—^{1}H$体系；异核相关谱有$^{13}C—^{1}H$，$^{31}P—^{1}H$，$^{15}N—^{1}H$，$^{11}B—^{1}H$等体系，其中最重要的是$^{13}C—^{1}H$体系。这类相关谱的特点是必须有混合期，在混合期中，有相互作用的核之间会发生极化或相干传递，而且是在单量子相干之间传递的，在检测期不仅获取各核的化学位移值，而且通过交叉峰获取有关核之间的耦合关系的新信息，从而获取特定化学位移的核之间的键联的关系，而这种信息无法从一维谱独自获得。二维相关谱比二维J谱更重要。其中化学位移相关谱用得最广泛。

化学修饰电极 chemically modified electrode; CME 是利用化学和物理的方法，将某些特定功能团或化合物修饰在电极表面，从而改变或改善电极原有的性质，实现电极的功能设计。化学修饰电极由于其表面有某些特定性质的功能团，具有分离、富集和改善电极反应可逆性的作用，从而提高测定的选择性和灵敏度。在有机

合成、电化学基础研究及催化等领域中都有广泛的用途。

化学修饰光透电极 chemically modified optically transparent electrode 在光透电极上通过化学修饰的方法如吸附、电化学聚合等形成一层特性薄膜，就成为化学修饰光透电极。如在金网栅电极表面修饰一层紫精聚合物后，该电极可以催化菠菜铁氧化还原蛋白和肌红蛋白的还原。

化学需氧量 chemical oxygen demand; COD 水体中能够被氧化的物质在规定条件下进行化学氧化过程中所消耗氧化剂的量。以每升水样消耗氧的毫克数表示，通常记为 COD。水中各种有机物氧化物进行化学氧化反应的难易程度是不同的，因此化学需氧量只表示在规定条件下水中可被氧化物质的需氧量的总和。化学需氧量主要反映水体受有机物污染程度。

化学需氧量测定 the determination of chemical oxygen demand 我国规定化学需氧量（COD）用重铬酸钾法。该法的原理是在酸性溶液中，一定量的重铬酸钾氧化水样中还原性物质，加入硫酸银作催化剂并加热回流，过量的重铬酸钾以试亚铁灵作指示剂，用硫酸亚铁铵溶液回滴。根据用量算出还原性物质消耗氧的量。用 $0.04167mol \cdot L^{-1}$ 浓度的重铬酸钾溶液可测定大于 $50mg \cdot L^{-1}$ 的 COD 值。

化学衍生法 chemical derivatization method 是色谱分析中用于处理样品的一种方法。即将欲分析的化合物通过化学反应转化为另一种化合物的方法。衍生化的目的是使那些本不能直接进样分析的物质经过衍生化反应后转变为可以很方便地进行色谱分析的物质。例如在气相色谱中，将沸点过高或过低，极性过强，热稳定性很差的物质进行衍生化后即可非常简便地对样品进行分析，如将长碳链脂肪酸衍生化为相应的甲酯或乙酯。

化学诱导动态电子极化 chemically induced dynamic electron polarization; CIDEP 在时间分辨 ESR 波谱中，通常会呈现异常的谱线强度。这表示自旋各能级尚未达到热平衡时的布居状态，这种现象的产生是由于样品受激发（通常是光激发）后顺磁物种的快速生成（或消失）使未偶电子的塞曼能级偏离了热平衡时的布居状态，在静磁场方向上产生异常大的电子自旋的极化。其结果会产生异常的微波吸收，相应的谱线叫做吸收谱线 A（absorption）；甚至也会伴随着发射微波的现象，相应的谱线叫做发射谱线 E（emission）。以上现象称为化学诱导动态电子极化。化学诱导动态电子极化一般可用三重态机理或自由基对机理解释。

化学诱导动态核极化 chemically induced dynamic nuclear polarization; CIDNP 用核磁共振（NMR）研究自由基反应体系的方法，因为经过自由基生成的产物的核自旋状态是处于热不平衡状态，即引起了核自旋极化，利用这种核自旋极化能够高灵敏度地检测自由基或推测其结构。其基本原理是：通过化学反应生成的自由

基对，经过一段时间后变为稳定产物时，由于电子自旋与核自旋的相互作用，自由基对的单重态和三重态发生混合，其结果，电子的 α 自旋和 β 自旋的分布不均等，从而引起核自旋分布的极化。这种极化使 NMR 信号的强度异常增大，或出现发射谱线。利用 CIDNP 可检测出用电子自旋共振也难检测出的短寿命自由基。

化学增活现象 chemokinesis 又称化学激动作用。细胞或生物体由于环境中某些化学物质的存在而表现活性增加的现象。这种作用的特点是细胞或生物体不规则运动或转动的频率和速度是由该化学物质决定的，化学增活现象不能决定细胞游走的方向。

化学增强模型 chemical enhancement model 是解释表面增强拉曼光谱（SERS）增强机理的一类化学模型，其中典型的是电荷转移模型最引人注目。当波长合适的激发光照射到金属表面时，电子可从金属共振跃迁到吸附分子上或从吸附分子共振跃迁到金属上，从而使分子的极化率有新的改变，产生 SERS 效应。

化妆品功能性评价分析 functionality evaluate analysis of cosmetics 包括化妆品对皮肤保湿效果、防紫外线效果、皮肤增白效果、抑制黑色素产生效果、护发-育发效果、抗头皮屑效果的测定。例如化学烫发剂的卷发效果、头发损伤、祛臭效果及皮肤弹性等的测定。

化妆品卫生检验 sanitation inspection of cosmetics 包括有害元素检验、酸碱度检验、有害有机物检验、功能助剂检验、微生物检验等。有害元素检验指的是检验化妆品中的汞、铅、砷。酸碱度检验是指 pH 值测定、酸碱测定。有害有机物检验指的是检验化妆品中甲醇、香柠檬烯、苯并芘等。功能助剂检验指的是检验化妆品中防腐剂、杀菌剂、甲醛、硼酸、氟化物、肉桂醚酯等助剂。微生物检验指的是检验化妆品中细菌总数、粪大肠菌群、绿脓杆菌、金黄色葡萄球菌等细菌。

化妆品系统分析 systems analysis of cosmetics 是指对某一类化妆品进行的系统分析。如口红（唇膏）分析，包括基剂分析和添加剂分析。基剂分析包含挥发成分的定性定量分析、油性原料分离分析、有机溶剂可溶物、水可溶物与水不溶物的定性分析等。添加剂分析包括防腐剂、抗氧化剂、紫外线吸收剂、樟脑、生育酚等的分析。

化妆品质量检验 quality inspection of cosmetics 化妆品质量检验方法有化学分析法、物理常数检验法、稳定性试验法、功能试验法等。化学分析法主要分析有效物含量、活性物、游离氨和双氧水等的含量。物理常数检验法主要是测定黏度、密度、浊度、细度等。稳定性试验法主要指耐热试验、耐寒试验、离心试验、色泽稳定性试验、泄漏试验、内压力试验等。功能试验法主要分析染色能力、残留物、干燥度、喷出率、牢固度、均匀度等。

还原电流 reduction current 还原反应产生的电流。

还原电势溶出法 reductive potentiometric stripping analysis; RPSA 利用还原剂将预电解富集的元素（常以难溶化合物的形式被富集）还原使之溶出的方法。适合于分析痕量金属和混合金属。

还原电位 reduction potential 当存在氧化体，电子从电极向氧化物迁移时，还原电流开始流出的电位。

还原晶胞 reduce unit 满足 Niggli 约化条件的素晶胞。对于一定的空间点阵而言，三个不共面的最短点阵矢量虽然是惟一确定的，但它们的取向及相互间的交角可能仍然有多种不同的组合，为了构成具有惟一性的单胞，必须对 3 个基矢添加必要的限制，称为约化，满足约化条件的单胞则称为还原晶胞或约化晶胞。P. Niggli 在 1928 年提出的约化条件规定了基矢之间的标量积所应满足的关系，保证了单胞的惟一性。

还原糖测定 determination of reducing sugar 分子中因含有游离醛基、酮基和半缩醛羟基而具有还原性的糖称为还原糖，还原糖的测定方法有高锰酸钾滴定法及直接滴定法。高锰酸钾滴定法是利用还原糖的还原性把铜盐还原为氧化亚铜，然后用硫酸铁将亚铜氧化为铜盐，以高锰酸钾溶液滴定氧化作用后生成的亚铁盐，根据高锰酸钾消耗量计算氧化亚铜含量，再换算出还原糖量；直接滴定法是样品经除去蛋白质后，在加热条件下直接滴定标定过的碱性酒石酸铜溶液，根据滴定的消耗的样品液体积计算还原糖含量。

还原性火焰 reducing flame 富含有 CH、CO、CN、C、C_2 等还原性物质具有强烈还原性的火焰。火焰的氧化还原特性取决于可燃混合气中燃气与助燃气的比例，燃气的量比按化学计量所需要的量有富余的富燃火焰是一种还原性火焰，其中 O、OH 等氧化性组分的分压低，有利于易形成单氧化物、难解离氧化物的元素的原子化，是分析测定中最常用的火焰。

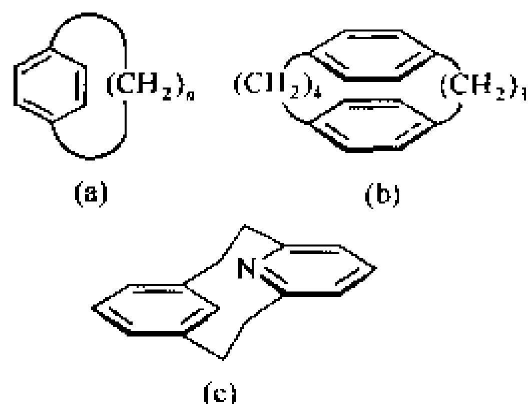
环刀法 cutting ring method 测定土壤毛细管持水量和土壤饱和含水量的方法。用环刀在野外取原状土，将盛有原状土的环刀称重（准确至 0.1g），盖上垫有粗滤纸的多孔底盖，将盛有原状土的环刀放入水中，保持水面与环刀上口平齐，但又不使水浸淹环刀的顶端，以免造成封闭孔隙。在水中浸泡一定时间（沙性土 4～6h，黏性土 8～12h），水分通过底盖小孔和滤纸沿土壤孔隙上升，到预定时间将环刀取出。用干布将环刀外部擦干，放到已知质量的器皿中，连同器皿一起称重，可测得土壤毛细管持水量。

环的张力效应 effects of annular strain 小环化合物由于碳的键角改变而使键长发生改变，引起环的张力的变化，从而导致键的振动频率的升高或降低。一般说来，环的张力加大时，环上有关官能团的红外吸收频率升高。对脂环酮羰基，六元环、五元

环、四元环、三元环的吸收频率逐渐升高，分别为 $1715cm^{-1}$、$1745cm^{-1}$、$1780cm^{-1}$、$1850cm^{-1}$；对脂环上的 CH_2，环己烷和环丙烷红外吸收频率分别为 $2925cm^{-1}$、$3050cm^{-1}$；而环烯烃中的双键，六元环、五元环、四元环的红外吸收频率则逐渐降低，分别为 $1639cm^{-1}$、$1623cm^{-1}$、$1566cm^{-1}$。

环电流效应 cyclic electronic current effect 当分子内存在着一些离域的化学键，比如大 π 键时，在外磁场作用下所产生的诱导的环电子电流可以在大范围内运动而很少受核的阻挠，这种环电流的运动产生了分子内各向异性的磁场，导致处于环电流所在平面外围的其余空间内的核受到去屏蔽，而以环电流中心为顶点垂直于环电流所在平面的上下两个圆锥体空间内的核受到屏蔽，这种效应为环电流效应。

环芳烃 cyclophane 用碳链将苯环的对位或间位连接而成的环状化合物。一般以碳链中碳原子的个数以及结合位置来命名。如图所示的是几种



(a) [n]对环芳烃；(b) [4,3]对环芳烃；(c) [2]间环[2](2,6)吡啶基环芳烃

代表性环芳烃。环芳烃是研究芳香环电子相互作用、生物体系反应的模型化合物。芳香环组成的腔还可以识别客体分子。

环糊精 cyclodextrin 由 D-吡喃葡萄糖经 α-1，4 糖苷键结合形成的环状低聚糖，呈两端开口的桶状结构。内侧由葡萄糖残基形成空洞，由亚甲基氢及葡萄糖苷氧组成，疏水；较窄的一端开口处是伯羟基，容易参与反应并被各种基团修饰；宽开口处为仲羟基。葡萄糖苷聚合数分别为 6，7，8 时，分别称为 α-、β-、γ-环糊精。环糊精由环糊精葡糖基转移酶作用于淀粉得到。环糊精可通过内腔的空间大小与客体分子尺寸的匹配作用以及色散力实现对疏水性中性分子的识别。各种有机分子被环糊精包结后，其性质发生改变，稳定性增强（如前列腺素等）、溶解性增大（如苯巴比妥等）、氧化性降低（维生素 A，D 等）以及挥发性减弱等。环糊精还可作为食品添加剂。环糊精的存在使酯的水解速度加快并对酯具有立体特异性和饱和性，可作为酶反应以及膜透过过程的模型。

环糊精电动色谱 cyclodextrin electrokinetic chromatography 以环糊精为假固定相，溶质基于其疏水性和分子大小与环糊精形成稳定性不同的包合物，从而产生不同的溶质迁移和手性识别。

环糊精衍生物气相色谱 cyclodextrin derivative gas chromatography 一种用环糊精衍生物作为固定液的气相

色谱分离方法，可用于天然产物或手性异构体的相互分离。环糊精本身在常温下呈固体状态，无法直接用作气相色谱固定相，但环糊精的羟基易于进行烷基化或酰基化反应。不同类型的羟基反应性不同，可以进行选择性烷基化，从而获得不同结构的环糊精衍生物。其反应性极大地依赖于其在葡萄糖残基上的位置，可以得到全烷基化的衍生物，也可以先将2-,6-位烷基化，再将3-位酰基化。已证明环糊精衍生物气相色谱法是手性异构体分离最有效的方法。

环糊精诱导室温磷光法 cyclodextrin induced room temperature phosphorimetry; CD-RTP 流体室温磷光分析法的一种。它是基于外部重原子和磷光分子同时进入CD空腔中，形成CD-重原子-磷光体三分子包结物。由于外部重原子提高分子系间窜跃几率，CD空腔的保护作用减小非辐射跃迁几率和其他的猝灭作用，从而可在室温下实现磷光测量。

环境白皮书 white book of environment 一国政府或议会正式发表的与环境有关的重要文件或报告书的封面有它惯用的颜色，白色的叫白皮书。实际上一国使用的颜色不限于一种，它是官方文书的代号。

环境背景值 environmental background value 环境要素在未受污染影响的情况下，其化学元素的正常含量，以及环境中能量分布的正常值，又称环境本底值。化学元素含量超过了环境背景值和能量分布异常，表明环境可能受到了污染。但在人类的长期活动，特别是现代工农业生产活动的影响下，自然环境的化学成分和含量水平发生了明显的变化，要找到一个区域的环境要素的背景值是很困难的。因此，环境背景值实际上是相对不受直接污染情况下环境要素的基本化学组成。环境背景值的测得和研究是环境科学的一项基础工作。为了确定环境背景值，应在远离污染源的地方采集样品，分析测定化学元素的含量，在此基础上，运用数理统计等方法，检验分析结果，然后取分析数据的平均值（或数值范围）作为背景值。

环境标志 environmental labeling 环境标志是一种产品的证明性商标，它表明该产品不仅质量合格，而且生产、使用和处理处置过程中符合特定的环境保护要求，与同类产品相比具有低毒少害、节约资源等环境优势。中国环境标志是1993年8月，由国家环保总局公布的。其图形由青山、绿水、太阳及10个环组成（见下图）。环境标志图形的中心结构表示人类赖以生存的环境；外围的10个环紧密结合，环环紧扣，表示公众参



与，共同保护环境；同时10个环的“环”字与环境的“环”同字，其寓意为“全民联合起来，共同保护人类赖以生存的环境”。

环境标准物质 environmental standard material 在环境分析与监测中，为了避免基体效应所产生的误差，通常把在组成和性质上与待测样品相似，而且组分含量已知的物质作为分析测定的标准，称为环境标准物质。因此，环境标准物质可定义为：按规定的准确度和精密度确定了某些物理特性值或组分含量值，在相当长时间内具有可被接受的均匀性和稳定性，并在组成和性质上接近于环境样品的物质。标准物质的名称至今尚未统一。很多国家沿用了美国国家标准局(NBS)的标准参考物质（standard reference material，SRM）一词。除此之外，也有称之为参考物质（reference material，reference substance）和标准样品（standard sample）的。近年来，国际标准化组织（ISO）建议使用“有证参考物质”（certified reference material，CRM）一词。我国国家标准局规定，我国的标准物质以BW为代号［B为biao（标），W为wu（物）的缩写］。

环境分析标准方法 standard methods of environmental analysis 在环境监测中，标准分析方法和标准物质是质量标准体系的两大支柱。环境分析标准方法是由某权威机构按照规定程序和格式编写的文件，是对环境中某分析项目所做的统一操作的技术规定。标准分析方法的成熟性应得到公认，它在经协作试验确定了方法的适应范围、误差程度及其有关参考数据以后，由权威机构审批并颁布。使用标准分析方法的目的是为了保证分析结果的准确性和精密度，保证对同一环境样品项目分析结果具有时间和空间的一致性。

环境分析方法 methods of environmental analysis 测定环境污染物的性质、来源、含量和分布状况以及环境背景值的方法。环境分析方法是在应用现代分析化学各个领域的测试技术和手段的基础上发展起来的，要求灵敏、准确、精密，并且具有简便、快速和连续自动等特点。环境分析方法很多，每种方法都具有一定的适用范围和对象。常用的环境分析方法可分为化学分析法、光谱分析法、色谱分析法、电化学分析法四类，每类又可根据所采用的分析原理和仪器分为若干种。

环境分析化学 environmental analytical chemistry 研究环境中污染物的种类、成分以及如何对环境中化学污染物进行定性分析和定量分析的一门学科。是环境化学的一个分支，简称环境分析，是环境科学和环境保护的重要基础。人们为了认识、评价、改造和控制环境，必须了解引起环境质量变化的原因，这就要对环境的各组成部分，特别是对某些危害大的污染物的性质、来源、含量及其分布状态，进行细致的监测和分析。环境分析化学依据的领域非常宽广，对象相

当复杂，包括大气、水体、土壤、底泥、矿物、废渣以及植物、动物、食品、人体组织等。环境分析化学测得的污染元素或化合物的含量很低，特别是在环境、野生动物、植物和人体组织中的含量极低，其绝对含量往往在 $10^{-6} \sim 10^{-12}$g 的水平。

环境分析质量控制 quality control of environmental analysis 在环境分析与监测中，为获得可靠的数据，通过配套实施各种质量控制技术和管理规程而达到保证各个环节（如采样、实验室分析测试等）的工作质量的一整套措施。

环境管理 environmental management 国家环境保护部门的基本职能。它运用行政、法律、经济、教育和科学技术手段，协调社会经济发展同环境保护之间的关系，处理国民经济各部门、各社会团体和个人有关环境问题的相互关系，使社会经济发展在满足人们的物质和文化生活需要的同时，防治环境污染和维护生态平衡。由于环境管理的内容涉及土壤、水、大气、生物等各种环境因素，环境管理的领域涉及经济、社会、政治、自然、科学技术等方面，环境管理的范围涉及国家的各个部门，所以环境管理具有高度的综合性。由于环境状况受到地理位置、气候条件、人口密度、资源蕴藏、经济发展、生产布局以及环境容量等多方面的制约，所以环境管理具有明显的区域性。由于每个人都在一定的环境中生活，人们的活动又作用于环境，环境质量的好坏，同每一个社会成员有关，所以环境管理具有广泛性。这些特点要求环境管理采取多种形式和多种控制措施。

环境和环境要素 environment and environmental element 环境是指围绕着人群的空间，及其中可以直接、间接影响人类生活和发展的各种自然因素和社会因素的总体。环境要素则是指构成人类环境整体的各个独立的、性质不同的而又服从整体演化规律的基本物质成分，也称环境基质。

环境要素分为自然环境要素和社会环境要素，但通常是指自然环境要素。环境要素包括水、大气、生物、阳光、岩石和土壤等。也有的学者认为，环境要素不包括阳光。环境要素组成环境的结构单元，环境的结构单元又组成环境整体或环境系统。如由水组成水体，全体水体总称为水圈；由大气组成大气层，全部大气层总称为大气圈；由土壤构成农田、草地和林地等，由岩石构成岩体，全部岩石和土壤构成的固体壳层称为岩石圈；由生物体组成生物群落，全部生物集群称为生物圈。阳光提供辐射能为其他要素所吸收。

环境监测 environmental monitoring 人们对影响人类和生物生存和发展的环境质量状况进行监视性测定的活动。环境监测包含的内容主要有三个方面：（1）物理指标的测定，包括噪声、振动、电磁波、热能、放射性等水平的测定；（2）化学指标的测定，包括各种化学物质在空气、水

体、土壤和生物体内水平的监测；(3) 生态系统的监测，主要监测由于人类的生产和生活引起生态系统的变化，如滥伐森林或草原过度放牧引起水土流失和土地沙漠化、污染物在食物链中的作用引起生物品质变化和生物群落的改变、二氧化碳和氟氯烃的过量排放引起的温室效应和臭氧层破坏等。进行环境监测应当注意：要有明确的检测目的；要有完整合理的监测计划；要有正确的监测方法、监测手段和质量保证措施；要有分析评价监测数据的科学方法。环境监测根据任务性质不同分别有科研监测、常规监测、事故监测、仲裁监测等多种的监测，它是进行环境管理和环境科研的基础，是环境科学的重要组成部分。

环境监测的遥感遥测技术 remote sensing and measurement technology in environmental monitoring 用于环境监测的遥感和遥测技术，系将各类遥感探测仪器安装在气球、飞机、卫星等运载工具或地面上，按计算机程控方式，从高空或空间对大气、陆地、海洋进行大面积探测，从而在整体上了解环境中污染物的种类、分布和运动情况。这是一种自动连续遥测技术，很有发展前途，并且有很大实用性和战略意义。

环境监测质量保证 quality assurance for environmental monitoring 保证环境监测数据可靠的全部活动和措施。其目的是为了避免由于错误的监测数据造成环境保护决策的失误。要保证监测数据的质量，就要有一个好的监测数据的质量要求和相应的分析测量系统。主要包括：采样方法，样品处理和保存、实验室供应（如蒸馏水、试验用气、供电、通风等），仪器设备的选择和校准，器皿的选择、洗涤和校准，试剂的选择、提纯和检验，基准物的选择、标准溶液的配制和标定，分析方法的选定，分析测量程序，数据记录、处理和结果审查，数据质量控制，数据保存，技术培训，实验室清洁度和安全等。此外编写有关的文件、指南、手册等均属环境监测质量保证的重要内容。

环境监测中的质量保证 quality assurance in the environmental monitoring 环境监测中的质量保证指监测分析的内部质量控制，包括空白试验，标准曲线核查，仪器设备定期标定，平行样分析，加标样分析等，是整个质量保证体系的基础。参见**环境监测质量保证**条。

环境扫描电子显微镜 environmental scanning electron microscope; ESEM 允许样品在与环境气氛相互作用的条件下进行动态观察的扫描电镜。该种电镜基本不需要对样品进行任何处理，也不需要很高的真空，可以在各种环境气氛下对样品进行分析和观察。适合于生物样品以及一些需要原位研究的体系，在研究材料的腐蚀过程等方面有特殊的应用。虽然该电镜的环境要求比较低，适合很多特殊样品的分析，但目前该类电镜的空间分辨率还比较低，限制了它的应用

范围。

环境生物监测的指示植物 indicate phyton in environmental organism monitoring 生物监测是保护生物生存条件、维护生态平衡的手段，是环境监测的重要组成部分。利用某些植物对某种污染成分的特殊敏感性，可以监测该成分的污染程度，即指示植物法，这种植物即为该污染物的指示植物。常见的指示植物有紫花苜蓿（*medicago sative*）（SO_2）、唐菖蒲（*gladiolus* sp.）（HF）、烟草（*nicotiana tabacum*）（O_3）、香石竹（*dianthus frams*）（C_2H_4）、早熟禾（*poa annua*）（PNA）。

环境卫生标准 environmental health standards 国家为保护居民生活条件和健康而规定的环境中有害因素的限量（最高容许浓度或剂量），以及为实现这些限量而规定的相应措施和要求的技术法规。环境卫生标准是进行卫生监督、评价和管理的法定依据，是保护环境和保障人群健康的重要手段。

环境误差 environmental error 由于实际的试验环境条件不完全符合测量所要求的条件而引起的误差。

环境形态分析的层次和模式 gradation and pattern of environmental species analysis 在环境污染物的形态分析系统中，形成了特定的“层次”概念，建立了相应的“模式”。所谓层次，指对污染物分析的不同要求和复杂程度分为不同的级别，如物态水平、总量分析水平和分子水平；所谓模式，指达到所要求分析层次的流程。它们通常用方框图或程序图表示。

环境遥测 environmental remote sensing 利用光学的、电子的和电子光学的遥感仪器从高空或远距离外接收被测物体发射或辐射的电磁波信息，加工处理成为能识别的图像或计算机用的记录磁带，以揭示环境如大气、陆地、海洋等的形状、种类、性质及其变化。环境遥测通过摄影和扫描两种方法获得环境污染的图像。摄影有黑白全色摄影、黑白红外摄影、天然彩色摄影和彩色红外摄影。彩色红外摄影效果最好，获得的环境污染影像轮廓清晰，能鉴别出各种农作物和其他植物受污染后的长势优劣。扫描主要是多光谱扫描和红外扫描，用于观测河流、湖泊、水库、海洋的水体污染和热污染有较好效果。

环境医学监测 environmental medical monitoring 用医学方法监测环境污染对人类健康的影响，观察人群健康水平和人体对环境污染的生物学效应。环境医学监测是环境质量评价的一个重要方面，它从人体健康角度来评价环境的影响。环境质量综合评价应包括医学评定。常用的医学监测方法有临床医学检查、流行病学调查和病理学试验。临床医学检查是在人群中进行定期体格检查，除了检查污染物对人体器官和系统的影响外，还为鉴别污染物的种类提供线索。

环境指数法 environmental index 用综合性的质量指数评价一个地区的

综合环境质量的方法。通常环境监测、调查取得的大量有关数据，难以直观反映环境质量现状，需要将其整理成人们易于理解和应用的少数直观数据，这是一个信息加工和提炼过程，参见**水质评价指数**条和**大气污染物标准指数法**条。

环境质量 environmental quality 一般是指在一个具体的环境内，环境的总体或环境的某些要素，对人群的生存和繁衍以及社会经济发展的适宜度，是反映人类的具体要求而形成的对环境评价的一种概念。到20世纪60年代，随着环境问题的出现，常用环境质量的好坏表示环境遭受污染的程度。例如对环境污染程度的评价叫做环境质量评价，一些环境质量评价的指数，就称为环境质量指数。环境是由各种自然环境要素和社会环境要素所构成，因此环境质量包括环境综合质量和各种环境要素的质量，如大气环境质量、水环境质量、土壤环境质量、食物环境质量，城市环境质量，生产环境质量，文化环境质量等。

环境质量标准 environmental quality standards 国家为保护人群健康和生存环境，对污染物容许含量所作的规定。环境质量标准体现国家的环境保护政策和要求，是衡量环境是否受到污染的尺度，是环境规划、环境管理和制订污染物排放标准的依据。近几十年来，一些国家先后颁布了各种环境质量标准。环境质量标准按环境要素分，有水质量标准、大气质量标准、土壤质量标准和生物质量标准四类，每一类又按不同用途或控制对象分为各种质量标准。

环境质量评价 environmental quality assessment 按照一定的评价标准和评价方法对一定区域范围内的环境质量进行说明、评定和预测。在地学等科学领域里，对一定区域自然环境条件或某些自然资源本来就有进行评价的传统。由于环境污染和生态破坏日益严重，环境质量评价已经具有新的含义。从20世纪60年代中期起，人们对环境质量评价进行了广泛的研究，并开始用环境质量指数描述环境质量。环境质量评价的基本目的是为环境规划、环境管理提供依据，同时也是为了比较各地区受污染的程度。

环境中的痕量分析 trace analysis of environment 环境样品种类繁多，污染物含量不一，有的在每升或每千克分析物中含量高至几克，有的低至纳克以下。环境分析监测中一般将被测物含量每升或每千克为1mg至1μg时，称为痕量分析。痕量分析通常选用火焰原子分光光度分析、离子选择电极分析及分光光度分析等方法。

环境中的痕量金属分析 trace metal analysis of environment 环境存在着约数十种痕量金属元素，其中有数种是有毒有害的如汞、铅、铬、镉、锑、砷、铍等。它们在水体、土壤和生物体中大多为10^{-6}级。环境痕量金属主要来源于金属矿物开采、冶炼以及其他工业生产过程的排放或外泄，有些通过燃煤、燃油排入大气，

如砷、锑、锡等；汽车排气中则多含有铅。水中常见的痕量金属有铬、铅、镉、汞、砷、铍、铜、锌等；农药和化肥会把砷、铅、汞、锡等带入土壤中。痕量金属在环境中虽然含量较低，但对环境的影响和生态的危害较大。痕量金属污染物与不同载体的结合态往往决定其在环境中的迁移状况。

环境中的形态分析 species analysis of environment 指对环境中污染物存在形式进行确定的有关技术。在环境科学中有相当一部分工作侧重在污染物的形态和分布研究方面，污染物的存在形态包括价态、化合态、结构态、结合态和吸附态等。不同形态的污染物在环境中有不同的化学行为，并表现出不同的污染效应。例如，六价铬有强烈毒性，而三价铬毒性较弱；有机汞如甲基汞的毒性远远超过无机汞；六六六有 7 种异构体，而其中 γ 型有最强杀虫力；多环芳烃的致癌活性与其化学结构有相应关系。痕量污染物与不同载体的结合态往往决定其在环境中的迁移状况。

环境自净能力 environmental self-purification 环境受到污染后，在物理、化学和生物的作用下，逐步消除污染物达到自然净化的过程。环境自净按发生机理可分为物理净化、化学净化和生物净化三类。物理净化指环境自净的物理作用，主要有稀释、扩散、淋洗、挥发、沉降等。如含有烟尘的大气，通过气流的扩散，降水的淋洗，重力的沉降等作用，而得到净化；浑浊的污水进入江河湖海后，通过物理吸附、沉淀和水流的稀释、扩散等作用，水体恢复到清洁的状态。化学净化指环境自净的化学作用，主要有氧化和还原、化合和分解、吸附、凝聚、交换、络合等。如某些有机污染物经氧化还原作用最终生成水和二氧化碳而使环境净化。生物自净指通过生物的吸收、降解作用使环境污染物的浓度和毒性降低或消失。植物能吸收土壤中的酚、氰，并在体内转化为酚糖苷和氰糖苷，球衣菌可以把酚、氰分解为二氧化碳和水。

环炉技术 ring-over technique 一种利用特制的环炉设备实施的微量分析技术。将少量试样点在滤纸上，利用一定的展开液从试样斑点中心向外冲洗，使试样中的可溶性组分向外扩散，同时利用环炉加热，使展开液在离斑点中心一定距离处蒸发，可溶性组分即浓缩富集在一个环圈上，再利用灵敏度和选择性高的试剂喷洒显色以进行定性和定量分析。

环路间隙共振腔 loop-gap resonator; LGR 环路间隙共振腔是带有狭缝间隙的圆筒状谐振腔。狭缝间隙平行于圆筒轴，相当于等价电路中的电容，而圆筒部分相当于电感。测试时样品置放在微波磁场集中的圆筒中心位置，而在狭缝间隙处诱导出微波电场，可以避免样品的介电损耗。为了防止狭缝间隙处的微波辐射造成的 Q 值下降，一般在环路间隙共振腔的外侧用圆筒状金属屏蔽。环路间隙共振腔可用镀有（高导电性）金属的陶

瓷制成；也可用在圆周方向上切有多个狭缝的金属圆筒，以便容易加上磁场调制。环路间隙共振腔的特点是在样品处的微波磁场强度大；微波磁场与微波电场很好地分离，由样品引起的介电损失几乎可以忽略，测定水样品时 Q 值的变化也不大。另外环路间隙共振腔的腔内容积较大，可以放置较大的样品或活体标本，这种腔在 L 波段 ESR 谱仪中使用较多。

环试验 ring test 利用界面反应进行物质鉴定的一种方法。例如将反应溶液非常仔细地加入盛于试管内的另一种液体中，使其在界面缓慢地反应，在两种液体相互扩散的同时反应产物形成鲜明的环状色带。

环形展开比移值 circular development R_f value 在环形展开时的比移值以 R_{fc}或 RP_f 表示。R_{fc}值定义为被分离物质由原点移动的半径与展开剂由原点移动至前沿半径的比值。由于在直线展开时的移动距离与环形展开的半径成平方根的关系，因此，$(R_{fc})^2 = R_f$，R_f 为直线展开时的比移值。

环形展开法 circular development 见径向展开法条。

缓冲容量 buffer capacity 由 Van Slyke 提出的衡量 pH 缓冲溶液缓冲能力的一种指标，常以符号 β 表示。其定义是：使 1L 溶液的 pH 增加或减少 dpH 单位所需加入的强碱 db(mol)，或强酸 da(mol)，其数学表达式为

$$\beta = \frac{db}{dpH} = -\frac{da}{dpH}$$

由此式定义的缓冲容量常称为微分缓冲容量（记为 β^D），与之对应的有积分缓冲容量（对应改变 1 个 pH 单位时所需的强酸或强碱量，记为 β^I），两者的关系为

$$\beta^I = \int_{pH_i}^{pH+1} \beta^D dpH$$

缓冲容量的大小与缓冲溶液的总浓度和缓冲溶液各组分的浓度比有关。例如 HAc-NaAc 缓冲溶液的缓冲能力与 HAc 和 NaAc 的总浓度 $c_{总}$ 和其浓度比有关，$c_{总}$ 愈大，缓冲容量愈大，$c_{NaAc}/c_{HAc} = 1$ 时缓冲容量最大，此时溶液的 pH 等于组成该缓冲溶液的共轭酸碱对的 pK_a 值。

缓冲溶液 buffer solution 广义的缓冲溶液是指能抵消少量外来物质（如酸、碱、络合剂或金属离子，氧化剂或还原剂及溶剂的稀释等）的影响，保持本身的某种特征量，如 pH，pM，pL 和电位等不发生显著变化的溶液。所以，分别对应有 pH 缓冲溶液，pM 缓冲溶液和 pL 缓冲溶液，但最常用的是 pH 缓冲溶液。pH 缓冲溶液由弱酸（或弱碱）和它的共轭碱（或共轭酸），例如，HAc-Ac^-，NH_3-NH_4^+，$H_2PO_4^-$-HPO_4^{2-}；两性物质，例如，苯二甲酸氢钾；强酸或强碱组成。

缓冲溶液添加剂 buffer additives 在毛细管电泳分离中，除了背景电解质外，常常还在缓冲溶液中添加某种成分，通过它与管壁或样品溶质之间

的相互作用，改变管壁或溶液相物理化学性质，进一步优化分离条件，提高分离选择性和分离度。

缓蚀剂 corrosion inhibitor 以适当浓度添加到腐蚀体系中使腐蚀速度明显降低的化学物质。

换算因素法 method of conversion factor 在确定的摄谱条件下用自电极法进行金属或合金的光谱定量分析，假定光源是稳定的，并且所测量的谱线黑度都位于乳剂特性曲线直线部分。若将一个样品摄于两块谱片上，则由于两块感光板性质与显影过程的差异，分析线对的黑度差 ΔS 将不同。对于第一块谱片 $\Delta S_1 = \gamma_1 \lg R$，第二块谱片 $\Delta S_2 = \gamma_2 \lg R$。上两式中 γ 是感光板的反衬度，R 为分析线对的强度比。由此可得：$\Delta S_1/\Delta S_2 = \gamma_1/\gamma_2 = K$。$K$ 为换算因数。求得换算因数 K，就可以将第二块谱片上分析线对的黑度差 ΔS_2 换算成相当于在第一块谱片上该线对黑度差 ΔS_1，即 $\Delta S_1 = \Delta S_2 \cdot K$。换算因数 K 一般是通过两块谱片上的基本元素的均称线对的黑度差求得，或者用二阶梯减光板摄谱，利用一条谱线的两个不同阶梯的黑度差进行换算。换算仍按公式 $\Delta S_1 = \Delta S_2 \cdot K$，而此时 ΔS_1 及 ΔS_2 则是均称线对的黑度差。用换算因素法作快速分析时，要求光源激发条件保持稳定。制作工作曲线与作分析试样时用的感光板必须是同一型号及批号，均称线对的黑度差最好在 0.5 左右。换算因数 K 一般应在 0.9 ~ 1.1 之间，超过这个范围，表明显影操作等不好，不能进行换算。

黄金分割法 gold cut method 又称 0.618 法。一种试验优化方法，将长度为 L 的优化区 $[a_0, b_0]$ 分割为长、短两段，长的一段为 x，短的一段为 $L-x$，如果 $\frac{L}{x} = \frac{x}{L-x} = \frac{1}{0.618}$，当将两个试验点 x_1 和 x_2 分别设置在距优化区两端 0.618 处时，无论经过试验之后舍去哪一个试验点，保留的试验点始终位于新试验区的 0.618 处。用这种方法设置试验点，可以加快优化进程。

黄曲霉毒素分析 aflatoxin analysis 黄曲霉毒素是由黄曲霉菌和寄生曲霉菌产生的毒性二次代谢产物，目前分离出的衍生物有 20 多种，其基本结构都有二呋喃环和香豆素（氧邻萘邻酮），其中 B_1、B_2、G_1、G_2 是四种最基本的形式。在自然界中易污染花生、玉米、麦类等粮谷及饲料。黄曲霉毒素 B_1 是目前已知天然致癌物中致癌力最强的一种，可诱发肝、肾、胃等多种器官病变，世界各国大多制订了其卫生限量标准。目前采用的分析方法主要为薄层色谱法、液相色谱法、酶联免疫法和荧光光度分析等。

黄曲霉素测定 determination of flavacin 黄曲霉素是黄曲霉菌的代谢产物，目前共发现有 17 种黄曲霉素，属剧毒物质，FAO/WHO 规定食品中的允许量 ≤ $15\text{ng} \cdot \text{g}^{-1}$。根据在 365nm 下，氧化铝层析板上曲霉素的荧光颜色分为 B（蓝色荧光）、G

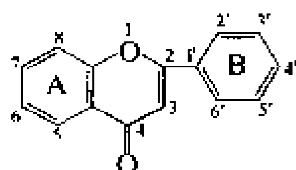
（绿色荧光）两大类。各种黄曲霉素毒性以 B_1 的毒性和致癌性最强，通常以检验黄曲霉毒素 B_1 为主。样品中黄曲霉毒素 B_1 经提取、浓缩、薄层分离后，在波长 365nm 紫外光下产生蓝紫色荧光，根据其在薄层上显示荧光的强度来测定含量。目前常用反相液相色谱法（荧光检测）来分离、测定各种黄曲霉素的含量。

黄色指数 yellowness index 用国际照明委员会（CIE）标准 C 光源照射塑料，以氧化镁为基准所得到的黄色值，定义为塑料的黄色指数。以 YI 表示

$$YI = 100(1.28X - 1.06Z)/Y$$

式中，X、Y、Z 分别为测得的三刺激值。对于不含荧光物质的无色透明、半透明和近白色不透明的塑料，可用其外观黄色程度的测量来评价塑料质量和老化程度。某些常用塑料，如聚苯乙烯、聚碳酸酯等往往以黄色指数的变化作为经长期暴露于光和热环境中性能变化的评定依据。适用于板状、片状、薄膜状和粉、粒状试样，不适用于含有荧光物质的塑料。

黄酮类 flavonoid 两个酚基经吡喃环或相似结构的三个碳原子结合形成的一类物质的总称。如右图，一般 A 环的5,7 位，B 环的3′,4′位有羟基或甲氧基存在。大部分黄酮类为邻位糖苷，大约有 3000 余种。黄酮类化合物普遍存在于植物中。虽然也存在于叶绿体以及其他颗粒中，但一般在细胞液中以配糖体的形式存在。这类物质水溶性好、本身有色，在适当溶液中发荧光，黄烷醇、黄酮醇是钨（Ⅵ）的荧光试剂。



灰分测定 determination of ash 总灰分是指植物组织或籽粒在空气自由流通下灼烧试样，有机物质经高温灼烧后，氧化燃烧变成气体逸出，剩下不再氧化燃烧的残渣，即矿物质（或称无机盐），主要为钾、钠、钙、镁、硫、硅、磷、铁及其他微量元素。灰分按其溶解性能分为水溶性灰分、水不溶性灰分和酸不溶性灰分三类。测定灰分的总量和各种矿物元素含量的方法有化学法、原子吸收法、等离子体原子发射光谱法等。

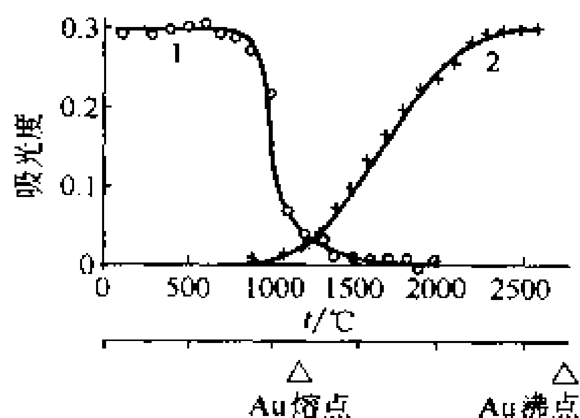
灰化 ashing 用高温除去样品中的有机基体的操作。在通常的分析样品处理时，是指将样品放入马弗炉中，在高温（400～700℃）下利用大气中的氧作为氧化剂破坏试样中有机组分的过程。氧化性酸可用于提高灰化效率。盛于瓷坩埚或铂坩埚中的液态或湿的试样在放入马弗炉之前，要先用蒸汽浴或轻度加热干燥。马弗炉应逐渐升温到所需温度，防止着火或起泡引起被测组分损失。灰化结束后，用适量合适的酸从坩埚中浸取残余物，并定量转移到烧杯等容器中，以便下一步进行分析。

在石墨炉原子吸收光谱分析中，它是指在样品原子化程序中除去试样基体的操作，是消除基体效应的有效手

段之一。灰化的有效性取决于灰化温度和灰化时间的选择，在不损失被测元素的前提下，尽量选用较高的灰化温度，配以适当的灰化时间，可以通过建立灰化曲线来优选灰化温度与时间。

灰化阶段 ashing stage; charring stage 石墨炉原子化升温程序中热解和驱除试样基体的阶段。在石墨炉原子化过程中，通常分4个阶段：干燥、灰化、原子化和除残。灰化阶段的任务是尽可能将试样基体除尽，同时又不损失被测元素，以减少以至完全排除基体的影响，为此要优选灰化温度与灰化时间。当被测元素是易挥发元素，或者是基体与被测元素挥发性相差不大时，可在试样中加入基体改进剂使基体转化为更易挥发的化学形态或将待测元素转化为更加稳定化学形态，以达到除尽基体和不损失被测元素目的。

灰化曲线 ashing curve; charring curve 吸光度随灰化温度的变化曲线。在石墨炉注入一定量的试样，在合适的干燥与原子化条件下，测定在不同灰化温度时的吸光度值，即可建立吸光度随灰化温度的变化曲线。根据此曲线可以确定在不损失被测元素的前提下最高允许使用的灰化温度和最佳灰化温度，通常选择达到最大吸收信号的最高温度作为灰化温度。如右图是金的灰化曲线，其形式具有典型性。在约900℃（Au熔点1064.4℃）开始有Au的损失，因此，允许使用的最高灰化温度应低于900℃。



1—灰化曲线；2—原子化曲线

灰化时间 ashing time; charring time 在灰化阶段，除去试样基体所需的时间。灰化时间的长短依基体性质而不同，水溶液样品，所需灰化时间短，甚至可以在升温程序中免去灰化阶段，对于生物样品，则需使用较长的灰化时间。合适灰化时间需根据吸光度随灰化时间的变化曲线来确定。

灰化温度 ashing temperature; charring temperature 在灰化阶段，除去试样基体所需使用的温度。灰化温度的高低取决于基体的性质。从除去基体的角度考虑，在不损失被测元素的前提下，尽量采用较高的灰化温度，最高允许使用的灰化温度需通过灰化曲线来确定。

灰色分析体系 grey analytical system 分析对象内部特性部分已知、部分未知或非确知的分析体系。实际工作中遇到的不少分析对象都是这类灰色分析体系。此名词源自人们用颜色来表示一个分析体系的信息完备程度，将体系内部信息已知的系统称为

白色分析体系，将内部信息未知或非确知的系统称为黑色分析体系，将内部信息部分已知、部分未知或非确知的系统称为灰色分析体系。灰色体系需用灰色系统理论来研究，该理论是我国华中理工大学邓聚龙教授创立的，主要研究系统模型不明确、行为信息不完备、运行机制不清楚这类系统的建模、预测、决策与控制等，提供了在贫信息条件下解决问题的新途径。

辉光放电光学发射谱 glow discharge optical emission spectrometry; GDO-ES 利用氩气的辉光放电作用产生的氩离子把部分样品从样品的表面溅射出来并进入辉光区，产生激发而发射出具有元素特征的光谱线。通过对光谱线波长和强度的测量就可以获得基质材料元素的定性和定量数据。辉光放电光学发射谱不仅可以获得表面的化学成分，同样利用其溅射功能还可以获得薄层成分的深度分析。

辉光放电检测器 glow discharge detector 是一种通用性气相色谱检测器。它的工作原理是：当载气中的组分进入辉光放电管时，放电电流就会有很大变化，以放电管作为惠斯通电桥的一臂，即可得失衡信号。其灵敏度介于热导检测器和氢火焰离子化检测器之间。由于在辉光放电管中有复杂的电离和碰撞过程，因此检测器的响应无一定规律，其线性范围为 $10^2 \sim 10^4$。可用于永久性气体分析。

辉光放电质谱 glow discharge mass spectrometry; GD-MS 利用氩气的辉光放电作用产生的氩离子把部分样品从样品的表面溅射出，然后通过四极质谱仪对样品离子进行质荷分析从而获得样品元素组成的谱仪。

辉光光源 glow source 低压气体放电的一种类型。在一根玻璃管两端各封入一个平板电极，内充压力为几托（1Torr = 133.322Pa）的惰性气体，当在两电极上施加的电压达到某一值时，此时气体点燃，形成辉光放电。利用辉光放电现象做成光谱分析用光源称为辉光光源。辉光放电的负辉光区激发特性最强，能激发高激发电位元素的谱线。发射光谱分析常用的辉光放电光源，有空心阴极放电光源和格里姆辉光放电光源两种，均属于直流辉光放电。

辉光曲线 glow curve 在辉光放电过程中，外加电压与电流之间的关系曲线。

回波检测（诱导）电子自旋共振 echo-detected (induced) electron spin resonance 在不同磁场下测定电子自旋回波信号（测试条件一致），就可以得到回波信号强度随磁场变化的曲线，即回波检测电子自旋共振（或回波诱导电子自旋共振）谱。回波可以用双脉冲（$90° - \tau - 180° - \tau -$ 回波）或三脉冲序列（$90° - \tau - 90° - \tau' - 90° - \tau -$ 回波）进行检测。显然改变 τ（双脉冲）或 τ'（三脉冲，固定 τ）值，回波检测电子自旋共振谱也会发生变化。回波检测电子自旋共振可用于研究弛豫时间，得到有关

分子运动的信息。

回归方程 regression equation 一种定量描述变量之间统计关系的数学表达式。基于变量之间关系的性质，分线性回归方程和非线性回归方程，基于影响因变量的自变量的数目，分为一元回归方程和多元回归方程。在分析测试中，应用最多的是基于一元线性回归方程来建立校正曲线。

回归方程精度 precision of regression equation 在建立回归方程时，对于给定的自变量 x，因变量 y 围绕按回归方程预测值 Y 的波动程度。它反映了响应值的离散性，以残余方差 S^2 或残余标准偏差 S 表示

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2}{n-2}$$

式中，y_i 为实测的响应值；Y_i 为按回归方程预测的响应值；n 为响应值的数目。引起响应值的离散的原因有自变量对 x 对 y 的非线性影响、除 x 之外其他因素对 y 的影响、试验误差等。

回归方程稳定性 stability of regression equation 由不同样本所得到的回归方程的波动性。表征回归方程的基本参数斜率 b 与截距 a 是随机变量，由一组确定的样本测量值拟合的回归方程，b 与 a 是常数，但用不同样本测量值拟合回归方程时，将得到不同的回归方程，具有不同的 b 与 a 值。b 与 a 的波动性分别用它们各自的方差 S_b^2 与 S_a^2 表示

$$S_b^2 = \frac{S^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$S_a^2 = S^2\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}{n\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}\right)$$

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2}{(n-2)}$$

式中，x_i 与 $\bar{x}$ 分别是自变量值及其平均值；y_i 与 Y_i 分别是因变量响应值及按回归方程预期的响应值；n 是建立回归方程的（x_i，y_i）数据对的数目；S 是残余方差。

回归分析 regression analysis 研究因变量与自变量（通常是固定变量）之间相关关系的一种数理统计方法。如果变量之间具有相随变动的关系，则称变量之间相关。变量之间相随变动的数量关系分函数关系与统计关系，前者表示变量之间数量上的确定性关系，后者表示变量之间相随变动时在数量上的统计规律性。研究变量之间统计关系的数学方法称为相关分析，回归分析是相关分析的一种特殊情况。两者的区别在于，相关分析是研究一个或一组变量与另一个或一组变量之间的统计关系，诸变量之间没有因变量和自变量之分；回归分析是研究因变量对一个或一组自变量的统计关系，因变量是具有概率分布的随机变量，而自变量为无概率分布的非随机变量（固定变量）。回归分析是找出描述这种相关关系的数学表达式，对所确定的数学表达式进行统计检验，确定最优回归方程，根据各自

变量的取值对因变量进行预报和控制。

回归平方和 regression sum of square 反映自变量与因变量之间的相关程度的偏差平方和。用回归方程来描述因变量 y 随自变 x 量变化的统计关系时，实验值 y_i 与按回归方程预测的值 Y_i 并不完全一致。当用回归线表示 y 与 x 的相关关系时，各实验点（x_i，y_i）不一定都落在回归线上，各实验点偏离回归线的程度，可用它们的总偏差平方和 Q_T 来表征

$$Q_T = \sum(y_i - Y_i)^2 + \sum(Y_i - \bar{y})^2$$

式中，$\bar{y}$ 是各实验值 y_i 的平均值。$Q_R = \sum(Y_i - \bar{y})^2$ 称为回归平方和，反映了 y 随 x 变化的相关性，Q_R 越大，y 与 x 之间的相关性越好。$Q_E = \sum(y_i - Y_i)^2$ 称为残差平方和，表征用回归方程或回归线拟合该组实验数据的优劣程度，Q_E 越小，表示拟合效果越好。

回归曲线 regression curve 一种描述变量之间统计关系的曲线图形。在分析测试中，应用最多的是一元线性回归曲线。利用回归曲线不仅能给出变量的点估计值，而且能给出估计值的置信区间，用它表示变量之间统计关系的优点是直观。

回归系数 regression coefficient 在回归方程中表示自变量 x 对因变量 y 影响大小的参数。回归系数越大表示 x 对 y 影响越大，正回归系数表示 y 随 x 增大而增大，负回归系数表示 y 随 x 增大而减小。

回火 flashback 供气速度小于燃烧速度时，火焰由燃烧器喷口向燃烧器内部传播的现象。回火会引发安全事故。现在生产的商品仪器都设置了防止回火的装置。从操作上，应保证供气速度大于燃烧速度，严格遵守操作规程。

回收试验 recovery test 通过在试样中加入已知量被测组分（元素）测定其回收率，以检验和估计系统误差的试验。在无标准物质和标准方法对照的情况下，它是最常用来检验系统误差和估计测定准确度的方法。当测试中只存在固定系统误差时，只说明在加入量水平没有检查出系统误差，并不意味着该分析方法不存在系统误差。在有些情况下，回收率依赖于所加入的量，因此，应加入不同的量进行回收试验，以更可靠地估计测定方法的准确度，同时在报告回收结果时应指明加入量值。

回转/回摆照相法 rotation/oscillation photography 记录和测定晶体衍射效应的照相方法。实验装置由提供特征 X 射线的光源、可沿垂直于 X 射线束的轴旋转的样品台和垂直于 X 射线束的平面或筒形 X 射线感光板所组成。在曝光过程中，单晶样品旋转 360°，称为回转法；晶体在一定的角度范围内摆动，则称为回摆法。由于波长不变，反射球具有固定的半径，当晶体转动或摆动时，必定有一部分倒易点阵点扫过反射球面而满足衍射条件，产生衍射。当回摆轴与倒易点阵面垂直时，就产生典型的层线

回摆图。回摆法主要用于晶体定向、测定晶胞参数和晶体的对称性以及收集射数据。回摆法结合电子影像板(IP)或电荷耦合器件(CCD)等类型的面探测器，可在短时间内记录大量的衍射数据，近年来已逐渐成为收集衍射数据的主要方法。

会聚束电子衍射 focused electron diffraction 电子束以具有足够大的会聚角入射样品，其透射束和衍射束分别扩展成一个个圆盘，盘内有确定的强度分布，叫做会聚束电子衍射图。它能精确的调整微晶取向、测定晶体对称性、薄晶微区点阵参数和薄晶厚度，提供晶体结构的三维信息。

汇编程序 assembly program 采用汇编语言编写的程序。用源语言的编写的源程序，计算机不能运行，必须经过翻译将其变为计算机所能执行的机器码程序，汇编程序就是为完成这种翻译工作而采用汇编语言编写的程序。汇编语言的语句与机器码所写的指令具有一一对应的关系。

混合白细胞反应 mixed teucocyte reaction 将两个个体的等量淋巴细胞一起孵育 3～5d 可形成淋巴母细胞，其数目与两个个体组织相容性抗原间的不相容程度有直接关系。

混合床离子交换固定相 mixed-bed ion exchange stationary phase 将阴阳两种离子交换剂混合均匀后填充到一根色谱柱中，或者在同一基质(载体)上导入阴阳两种离子交换基团所得到的离子色谱填料。它可用于阴阳离子的同时分离。

混合床柱 mixed bed column 也称混合填充柱。是用两种不同功能的色谱填料混合后填充而成的色谱柱。它可用于同时分离两类化合物、如阴离子交换剂和阳离子交换剂混合床柱可实现阴阳离子的同时分离。

混合凝集反应 mixed agglutination reaction 将含有相似抗原决定簇的两种不同细胞混合在一起，加入相应抗体后出现的两种细胞间的混合凝集反应。

混合溶剂 mixed solvent 两种或两种以上有机溶剂的混合溶液。在液相色谱中，为了调节流动相的洗脱强度，经常使用混合溶剂作流动相。

混合指示剂 mixed indicator 为满足在化学计量点附近突跃较小的某些滴定(如某些弱酸、碱的滴定)的要求，以获得变色范围更窄、颜色变化更为鲜明的滴定终点指示，常将两种 pK_{HIn} 值相近、其酸型与碱型的颜色又互为补色的指示剂按一定比例混合起来使用，称为混合指示剂。例如，若将甲基红($pK_{HIn}=5.00$，由红变黄的变色范围是 pH=4.4～6.2)与溴甲酚绿($pK_{HIn}=4.90$，由红变蓝的变色范围是 pH=3.8～5.4)混合，则能在 pH 5.1 时得到由紫红与蓝绿互补而成的灰色的敏锐变色点。另一种配制混合指示剂的方法是：一种酸碱指示剂与某种惰性染料混合，以染料颜色作背景，利用化学计量点前后酸碱指示剂的颜色与染料颜色的叠合而出现变色点或很窄的变色域来指示滴定终点。例如，甲基橙或甲基

红与亚甲蓝或靛蓝磺酸钠混合，滴定终点颜色由紫变绿，色变的分辨度可达0.2pH。

混晶 mixed crystals 若两种离子能分别形成分子式类型相同、晶体几何形状相似、晶格常数相近的两种晶型化合物（称为类质同晶化合物），则可能在一种离子沉淀形成晶体时，另一种共存离子取代晶体中的这种离子的位置而形成混晶，此过程称为类质同晶取代。例如，$MgNH_4PO_4$-$MgKPO_4$，$BaSO_4$-$PbSO_4$ 等混晶。不同晶型或晶格常数的固体化合物也能形成有限混溶性的混合晶体，这种混合晶体称为不规则混合晶体。

混晶共沉淀 mixed crystals coprecipitation 因形成混晶而引起的共沉淀现象。只有当共存杂质离子与沉淀构晶离子的半径相近（相差小于10%），且沉淀形成的化合物的晶体结构相似、晶格大小大致相同时，才能产生杂质离子因形成混晶而引发共沉淀。例如，以 $MgNH_4PO_4$ 形式沉淀 Mg^{2+} 时，因 K^+ 和 NH_4^+ 的离子大小相近，K^+ 可取代部分 NH_4^+ 形成 $MgNH_4PO_4$-$MgKPO_4$ 混晶共沉淀。

活度 activity 又称有效浓度，是一种热力学浓度。对于由1,2,3,…,n个组分组成的体系，组分i的化学势以μ_i表示时，

$$\mu_i = RT\log\lambda_i$$

式中，λ_i为绝对活度；T为绝对温度；R为摩尔气体常数，其值等于$8.314J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$。以$\mu_i^{\ominus}$表示标准状态下的化学势时，上式改写为

$$\mu_i - \mu_i^{\ominus} = RT\log a_i$$

式中，a_i称为组分i的相对活度，一般简称活度。理想混合气体、理想溶液时，活度a_i等于摩尔分数x_i。对于实际体系，$a_i = \gamma_i x_i$，式中，γ_i称为活度系数。该公式用于溶液时，除摩尔分数外，还可用物质的量浓度、质量浓度等表示，但活度系数也随之变化。通过蒸气压、渗透压、溶解度等的实验测定可以求活度。电解质溶液的活度通过电池的电动势求得。

活度系数 activity coefficient 离子或分子在化学反应中起作用的有效浓度，用符号a表示。例如，当A物质的平衡浓度为［A］时，其活度$a_A = \gamma_A[A]$，γ_A称为A物质的活度系数。在无限稀释的情况下（溶液中所有溶质的浓度趋于零时），活度系数$\gamma \to 1$，随溶液浓度增大，$\gamma < 1$，$a <$［A］。可以通过计算溶液离子强度I（参见**离子强度**条）从手册中查得（或由广义的Debye-Hückel方程计算）各种价数离子的γ，从而求得其a。中性分子的活度系数常粗略地视为等于1。

活化 activation 将样品放置在反应堆、加速器或同位素源等辐照装置中经受辐照，使样品中稳定核转换为放射性核素的过程。

活化方程式 activation equation 描述辐照过程中放射性核素生长与衰变规律的方程式。被测定靶元素在粒子流辐照下转变为放射性核素，已生成的放射性核素同时又发生衰变，在辐照t时间后，在t时刻的放射性活

度为

$$A_t = f\sigma N(1 - e^{-0.693t/T_{\frac{1}{2}}})$$

$$N = 6.023 \times 10^{23} \theta \frac{W}{M}$$

式中，$T_{\frac{1}{2}}$ 是放射性核素的半衰期；W 是靶元素的质量；M 是靶元素的原子量；θ 是靶核的天然丰度。A_t 与靶核的数目 N、粒子通量 f、核反应截面 σ 成正比，与辐照时间 t 呈指数关系。辐照结束后放射性核素不再增长，经过 t' 时间后的放射性活度为

$$A_{t'} = 6.023 \times 10^{23} f\sigma \frac{W}{M} \times (1 - e^{-0.693t/T_{\frac{1}{2}}}) \times e^{-0.693t'/T_{\frac{1}{2}}}$$

该式是活化分析中最基本的方程式。

活化分析 activation analysis；AA 又称放射化分析（radioanalysis）。是基于将样品中稳定核转换为放射性核素，通过测量放射性核素衰变时放出的缓发辐射或直接测量核反应放出的瞬发辐射来确定元素及其含量的一种核分析方法，是一种绝对分析方法。1934 年英国物理学家查德威克（J. Chadwick）和戈德哈伯（M. Goldhaber）实现了第一次光子活化分析，1936 年匈牙利化学家赫维西（G. C. de Hevesy）和莱维（H. Levi）完成了历史上首次中子活化分析，1938 年美国化学家西博格（G. T. Seaborg）和利文古德（J. J. Livingood）进行了第一次带电粒子活化分析。根据所应用的核反应类型，它可分为三类：（1）中子活化分析，利用的主要核反应有（n，γ）、（n，α）和（n，p）；（2）γ 光子活化分析，利用的主要核反应是（γ，n），对于原子序数小的轻元素，（γ，p）反应也是重要的；（3）带电粒子活化分析，利用的核反应有（p，n）、（d，n）、（d，p）、（α，n）、（H^3，p）、（H^3，n）等。中子活化分析在各种活化分析方法中应用最广，γ 光子活化分析法测定 C、N、O、F、某些中等质量元素和重元素如 Fe、Ti、Zr、Tl、Pb 等，具有相当高的灵敏度。带电粒子的射程有限，引起的核反应基本上发生在试样的表面，适于做表面分析和轻元素的活化分析。活化分析是测定各种物料中痕量元素的有效手段，其特点是：灵敏度高，对大多数元素的灵敏度为 $10^{-6} \sim 10^{-14}$ g；特征性，各元素生成的放射性核素具有其特征的半衰期和辐射能量；精密度和准确度好；有时不需要进行化学处理，实现无破坏分析，即使分离也不需定量分离，且不必担心玷污；能进行多元素同时测定，在一份试样中可同时测定 30 ~ 40 种元素，最高达 56 种元素；基体效应小，除了基体组分是吸收截面高的元素之外，适用于各种化学组成复杂的试样；可测定同位素组成；可实现自动化分析；分析设备复杂和价格贵；分析周期长。

活化过电位 activation overpotential 电化学反应过程引起的极化产生的过电位。

活化剂 activator 又称去钝化剂（depassivator）。是具有活化（去钝

化）作用的化学试剂。

活泼氢的化学位移 chemical shift of active hydrogen 指化合物分子中—OH、＞NH，—NH_2，—SH 等基团中的氢。它们可相互进行化学交换，又可形成氢键。活泼氢的化学位移 δ' 值与体系温度、溶剂及其浓度关系极大。通常，活泼氢的交换速率—OH 快于＞NH，更快于—SH。—SH 的交换速率慢，其自旋耦合规律和一般氢相同。＞NH 基团氢间或和其他活泼氢发生快交换，则常呈一尖单峰。若以中等速率交换，则呈一宽峰。出现在与交换相关质子峰的权重平均位置。若慢交换，^{1}H 受 ^{14}N 的耦合，将分裂成等强度的三重峰。—OH 许多情况下出现单峰，可为尖锐峰，也可为钝峰，其峰位随着 pH 值与溶剂极性的影响很大。当活泼氢化学位移不易辨认时，可在试样中滴加重水，充分搅匀，活泼氢被重水中的氘交换并取代，其峰立即消失，用以确定活泼氢的存在或者活泼氢基团的存在。

活泼氢谱峰 active hydrogen peak 化合物分子中比较容易解离并与其他分子中的氢或氘发生化学交换的氢。它的化学位移 δ 值受其所属基团、所处的环境、体系的温度、浓度及溶剂的影响很大，因此峰形、峰位都不便确定。常见的活泼氢有—OH、＞NH、—SH。活泼氢的交换速率按大小排列为—OH $>$ ＞NH $>$ —SH。—OH 中的氢会出现分子内部或分子间的氢键缔合，当交换速度中等时呈现钝峰，否则应为尖峰。＞NH 质子间或与其他活泼氢发生快交换时，将呈一尖锐单峰。若以中等速度交换时，则呈一宽峰。它们的位置都处于各有关质子峰的权重平均值处。若属慢交换，^{1}H 受 ^{14}N 的耦合，分裂成三重峰。—SH 由于交换相当慢而不致显示平均化的吸收峰。为了识别活泼氢，简易而有效的方法是在试样中滴入重水，经搅匀，活泼氢因与重水发生交换其 NMR 谱峰减弱或立即消失，对比重水交换后的谱图与原谱图即可判断。

活塞泵 piston pump 又称柱塞泵。是以活塞的移动直接驱动液体的高压输液泵。液相色谱中最常用的输液泵是往复式活塞泵，其中又包括单活塞和双活塞两种往复泵。

活体电子自旋共振 in vivo electron spin resonance 将动植物或其部分组织不经任何前处理，就直接测定 ESR。多用于动植物的生理、病理、药理等的机理研究。因 X 波段 ESR 谱振腔的容积都较小，且动植物样品容易有介电损失，所以一般均用有环路间隙共振腔的 L 波段 ESR 谱仪进行活体电子自旋共振测试。动植物内部顺磁物种的浓度一般都很低，可以事先加入稳定的氮氧自由基作为自旋探针。

活体分析 in vitro 将生物物质或生物体内发生反应的特定部分在试管中进行实验的方法。取自拉丁语"生物体内"一词，是为了强调生物体内的状态与生物体外不同而使用的专门用语，在生物科学研究中经常使用。一般对微生物而言指无细胞体系，对于多细胞生物指组织培养、细胞培养或无细胞体系。

活体活化分析 in vivo activation analysis 又称体内活化分析。是在严格控制照射剂量的条件下用中子照射生物活体，使体内欲分析元素活化变为具有特征射线的核素，在体外用高灵敏的探测器鉴定所产生的放射性核素和测量其放射性活度，以确定生物活体内被测元素的含量的分析方法。目前用于生物活体内元素分析的都是热中子或快中子活化分析。它分为全身体内活化分析和局部体内活化分析，前者最成功的例子是测定体内的钙，后者典型的例子是测定甲状腺中的碘。其主要问题是照射剂量不能过大，因此只能测定体内含量高的一些元素如氮、氢、钠、氯、钙、磷等。主要用于医学基础研究和疾病诊断。

活性 activation 表征气-固色谱中固体吸附剂的吸附能力的一种特性。作为固定相的各种吸附剂之所以能起分离作用，是由于表面具有适当能力的吸附作用，但在长期的使用或存放后，由于表面吸附了大量的水或其他物质而失去吸附能力，因而不具备分离作用（如分子筛易吸水，当它吸水后，水分子就占据了分子筛的空穴，使其失效），这时需进行活化处理，以恢复吸附剂的活性。

活性部位 active site 又称活性点。对于液相色谱吸附固定相而言，固定相表面直接与溶质分子产生吸附作用的位置。其含义与活性中心近似。

活性硅胶 activated silica gel 经化学处理后，其表面存在大量活性硅醇基（硅羟基）的硅胶微粒。它是吸附色谱中最常用的吸附固定相。

活性炭吸附法 charcoal adsorption method 利用活性炭的高表面积和强吸附性能进行分离和富集的方法。活性炭吸附属于物理吸附，具有一定选择性。非极性物质比极性物质易于吸附，同系物一般随沸点的增加吸附增强，压力增加或温度降低吸附也增强。采用该法富集高纯金属和化合物中10^{-9}级或低于10^{-6}级杂质时，若选择适宜的螯合剂可使回收率在95%以上，富集倍数可达10^3～10^4。该法通常用于痕量元素的分离富集，也被广泛用于糖及一些有机物的脱色、水及空气的净化、三废处理、溶剂回收、气体的分离以及作为催化剂或催化剂载体等。

活性氧化铝 activated aluminium oxide 经化学处理后，其表面存在大量活性羟基的氧化铝微粒。它可用作吸附色谱和离子色谱的固定相。

活性中心 active center 对于液相色谱固定相而言，固定相表面直接与溶质分子产生相互作用的活性基团或

吸附点。其含义与活性部位近似。

火花光谱 spark spectrum 用火花放电作为激发光源时得到的发射光谱。由下列两部分组成：(1) 电极及其载带物质的离子和原子谱线。(2) 离子电子复合时所辐射的连续光谱，成为光谱的背景。火花光谱的特点是因为火花光源的激发温度比较高，所以一般元素在火花光谱中出现大量的离子谱线。影响火花光谱中待测元素谱线强度的因素很多，如电容、电感、电压等参数，放电所处气氛，分析间隙大小等。火花光谱主要用于金属和合金的定量分析。

火花光源 spark source 光谱分析中常用的激发光源。火花是由于用高压（10000～40000V）的交流电向电容器充电，积蓄能量，然后很快放电而产生。调节放电线路中的电容量和电感量，可以改变放电的特性，从而影响发射光谱的谱线强度。火花放电是一系列振荡放电，在击穿分析间隙或辅助间隙的瞬间具有相当高的瞬间电流，每一次放电依靠高压自行击穿，当间隙电压不足以保持放电时，熄灭。火花的特点是：(1) 由于放电瞬间电流密度大，激发温度高（一般为7000～10000K），有利于激发高激发电位的原子谱线和离子谱线；(2) 电极温度低，即使是低熔点的金属也不易熔融；(3) 试样蒸发速度低，检测限不如电弧低；(4) 放电稳定，分析精密度好。

火花线 spark line 在原子发射光谱中，当采用激发能量较高的火花作光源时，所产生的离子线较多，故此离子线也称为火花线。

火花源杂质分析 impurity analysis by spark source 测定高纯材料中微量杂质的一种方法。高频火花电离源可分析多种导体、半导体和绝缘体材料，对所有的元素有大致相同的电离效率，可实现多元素同时检测，且灵敏度高，因此非常适合微量杂质的定量分析。选择待测元素的特征谱线，测定其强度，利用相对灵敏度因子或相对灵敏度系数，进行计算得到各杂质元素含量的定量结果。

火花源质谱仪 spark source mass spectrometer; SSMS 一种以射频火花源为离子源的早期无机质谱仪。样品电极在高频高电压下，打火放电产生离子。由于火花放电产生的离子较多，并且离子运动的能量和方向也比较分散，为了达到很好的分辨，必须采用电场和磁场双聚焦分析器来分离不同质量的离子。这种仪器的灵敏度很高，常用于半导体材料和高纯金属的纯度分析。在环境污染物的测定方面也有一定应用。

火试金法 fire assay 一种利用熔融过程选择性富集痕量无机元素的方法。例如，为测定矿石中的银、金和铂等贵金属，将样品，氧化铅（或氧化铜），助熔剂和还原剂的混合物在坩埚内加热到高温，贵金属就选择性地溶解在熔融的铅（或铜）里，留下无用矿物或杂质成为液体矿渣。当冷却时，含贵金属的铅（或铜）块从坩埚底部与矿渣分离，除去铅

（或铜）后可测定贵金属。

火焰背景 flame background 由火焰本身发射、吸收、散射辐射产生的背景，包括火焰发射产生的背景。在原子吸收光谱分析中，采用调制辐射光源的方法消除火焰直流发射的影响；火焰及其燃烧产物（如 CH、OH、C_2 等）对入射辐射吸收产生的宽带背景，火焰在 <250nm 短波区有明显的吸收，OH 在 309 ~ 330nm、CH 在 387 ~ 410nm、C_2 在 309 ~ 330nm 有吸收带；火焰不完全燃烧产生的微粒对辐射的散射，使入射辐射偏离正常光路，检测器检测到的光强减小，引起“假吸收”。对于分子吸收和散射产生的背景，采用校正背景方法消除其影响。

火焰的透射性 transmissibility of flame 火焰透射辐射的特性。在 <220nm的短波紫外区，烃类火焰有较强的吸收，氢火焰比烃火焰有更好的透射性能。火焰对辐射的吸收直接限制了它的所应用的波长范围。特别是在测定分析波长位于 <220nm 区域的元素 As、Se、Hg、Pb、Zn 等时，要考虑火焰吸收对测定的影响。

火焰发射光谱 flame emission spectrum 用火焰作为激发光源时得到的火焰发射光谱，包括可燃气体和助燃气体如 CO、OH、CH 等燃烧时产生的分子光谱，溶剂如 H_2O 等在火焰中产生的分子光谱，溶质如 K、Na 在火焰中产生的原子光谱和溶质在火焰中产生的分子光谱，如 NaCl、CaO 等。前两种统称为焰背景，后两种用作分析。火焰光谱的特点是激发温度比较低，对共振线的激发电位低的元素如 K、Na、Ca 等的激发最为有利；光谱较简单，几乎观察不到离子谱线，但存在分子谱带。影响火焰光谱中待测元素谱线强度的因素有：（1）试液喷雾的液滴大小或吹入粉末的粒度；（2）待测元素化合物的挥发性；（3）化合物分子的离解难易；（4）谱线激发电位的高低；（5）试样的总成分；（6）火焰中发生的化学反应。火焰发射光谱主要用于对碱金属和碱土金属元素的测定，高温火焰能测定的元素更多。

火焰光度法 flame spectrophotometry 以火焰为光源进行试样蒸发、元素原子化和光谱激发的一种原子发射光谱法。火焰激发光源的温度较低，只能激发碱金属和碱土金属的一些激发电位低的谱线，因此，它主要用来测定碱金属和碱土金属，使用高温火焰，可以测定更多的元素。它的优点是光谱简单，测定的精密度好，仪器设备简单，操作方便，分析速度快。火焰光度法被广泛地应用于临床、矿物、化工、农业等领域中，主要用来测定钾、钠及其他碱金属、碱土金属等。

火焰光度计 flame photometer 研究和检测火焰发射光谱的仪器。由雾化器、燃烧器、光学系统、检测器和显示系统构成。简单的专用火焰光度计常使用滤光片。主要用于碱金属和碱土金属的测定。

火焰光度检测器 flame photometric

detector; FPD 是对含磷、含硫的化合物有高选择性和高灵敏度的一种气相色谱检测器。其工作原理是：当样品在富氢火焰里燃烧时，含磷有机化合物主要是以 HPO 碎片的形式发射出波长为 526nm 的特征光，含硫化合物主要是以 S_2 分子形式发射出波长为 394nm 的特征光。这种特征光通过滤光片选择后，由光电倍增管接收，转换成电信号，经微电流放大器放大后记录下来。火焰光度检测器是选择性的检测器，对有机磷、硫化合物的检测限比碳氢化合物高 1 万倍，因此排除了大量溶剂峰和其他碳氢化合物的干扰，非常有利于痕量磷、硫化合物的分析，最小检测量可达 10^{-11}g。火焰光度检测器的线性范围，对含磷有机化合物可达 10^4。对含硫化合物不是线性关系而是对数关系，用双对数作图，线性范围为 10^2。

火焰光源 flame photosource 火焰是最早用发射光谱分析的一种光源。与其他光源相比，火焰光源的优点是仪器简单、谱线少、稳定性好，其缺点是温度比较低、能有效分析的元素有限。

火焰燃烧速度 flame burning velocity 燃气和助燃气的混合气体由燃烧点扩展到邻近区以使燃烧过程持续下去的速度。它是化学火焰的重要特性之一，决定了火焰燃烧的稳定性和使用安全性。常用的空气-乙炔火焰的燃烧速度为 158cm · s^{-1}，氧化亚氮-乙炔火焰的燃烧速度为 160cm · s^{-1}。为保证稳定燃烧和安全使用，可燃混合气的供气速度要等于或稍大于燃烧速度，供气速度过小，会产生回火；供气速度过大，会使火焰飘离燃烧器，变得不稳定，甚至灭火。

火焰原子化 flame atomization 以化学火焰为热源使试样转变为自由原子蒸汽的过程。常用的火焰是空气-乙炔火焰，近年来，氧化亚氮-乙炔火焰也获得较多的应用。空气-乙炔火焰的温度可以达到 2500K，氧化亚氮-乙炔火焰的温度可以达到 2990K，可以使约 70 种元素原子化。化学火焰燃烧稳定，背景噪声较低，操作方便，使用安全，广泛地用于火焰光度分析和原子吸收光谱分析中。

火焰原子吸收光谱法 flame atomic absorption spectroscopy 以化学火焰为原子化器的原子吸收光谱分析法，是 1955 年由 A. Walsh、C. T. J. Alkemade 和 J. M. W. Milatz 分别独立地提出。为表彰 A. Walsh 对发展原子吸收光谱所做出的杰出贡献，1991 年在挪威卑尔根召开的第 27 届国际光谱学大会（CSI）上授予他第一届 CSI 奖。1965 年 J. B. Willis 将氧化亚氮-乙炔火焰引入原子吸收光谱分析，使可测定的元素达到近 70 种之多。作为一种分析测试方法，火焰原子吸收光谱分析已日臻完善。该法的优点是，灵敏度高，选择性好，抗干扰能力强，应用范围广，设备简单，操作方便。不足之处是，每一种元素都需要使用自己特定的元素灯，不适合进行多元素同时测定。

或然误差 probable error 在一组测量值中，大于和小于或然误差的测量值各占总测定值数目的一半，记为 λ。或然误差 λ 与标准偏差 S 的关系是 $\lambda = 0.6745S$。

霍尔兹马克变宽 Holtzmark broadening 又称为共振变宽。同种元素基态原子之间的碰撞引起的变宽，引起的强度分布类似于洛伦兹变宽，但不引起谱线的非对称化和分布极大的红移。在通常光谱分析条件下，分析原子浓度都很低，共振变宽的谱线宽度 $\Delta\nu_R \approx 10^{-5}$nm，因此，共振变宽效应可以忽略不计。

霍乱红试验 cholcra red test 用来区别霍乱弧菌和类似细菌的一种试验。将未知细菌在含 0.1% KNO_3 或 $NaNO_3$ 的蛋白胨水中生长，在培养物中加 1～2 滴浓硫酸，形成红色亚硝基吲哚的，则是阳性反应。

J

机械泵 rotation pump 是真空泵的一种，主要利用旋转压缩的方法，通过真空泵油把残余气体从真空部分压缩抽到大气中去。其旋转速度较低，一般用来获得 10^{-1}Pa 的低真空。是目前使用最广泛的一种低真空设备。但由于使用油介质，使得真空系统容易返油。

积分器 integrator 指能将对应于时间的检测信号，即能对色谱峰的峰面积进行积分的装置。有自动和手动两种类型。

积分吸收系数 integrated absorption coefficient 在原子吸收光谱谱线轮廓内对各种频率辐射吸收系数的总和称为积分吸收系数。

$$\int k_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{\pi e^2}{mc} f_{oi} N$$

式中，k_ν 是对频率为 ν 的辐射的吸收系数；e 是电子电荷；m 是电子质量；c 是光速；f_{oi} 是吸收振子强度，定义为每个原子能吸收特征辐射的平均电子数，是由跃迁矩所得到的吸收强度的理论量度；N 为吸收光程上单位体积内能吸收频率为 ν 特征辐射的原子数目。积分吸收系数与原子数目成正比，是原子吸收光谱法定量分析的基础。1955 年澳大利亚科学家瓦尔西（A. Walsh）从理论上证明，在通常火焰和石墨炉原子吸收光谱测定

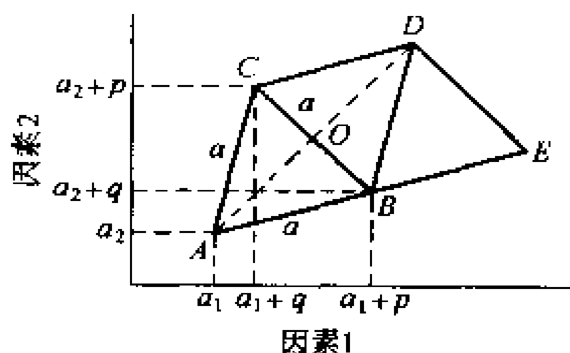
的条件下，吸收光谱的谱线轮廓主要取决于原子热运动的多普勒变宽，积分吸收系数 $\int k_\nu d\nu$ 与峰值吸收系数 k_0 成正比，导出了峰值吸收系数 k_0 与原子数目 N 之间的基本关系式

$$k_0 = \frac{2}{\Delta\nu_D}\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\frac{\pi e^2}{mc}f_{oi}N$$

式中，$\Delta\nu_D$ 是多普勒宽度。当使用锐线光源时，可容易地测得峰值吸收系数。瓦尔西的开创性工作为原子吸收光谱发展成为实用的痕量元素分析方法做出了巨大的贡献，被国际上公认为原子吸收光谱分析的奠基人。

积分型检测器 integrating detector 可连续地测定色谱柱后流出物总量的一类检测器，它显示的是某一物理量随时间变化的累加，因此，所得的色谱图为一台阶型曲线。例如在体积色谱法分析中，对各被分离组分体积的累加检测就属于此种类型。

基本单纯形法 basic simplex method；BSM 一种动态的试验优化方法。1962 年由 W. Spendley 提出。所谓单纯形，是多维空间中的一种凸图形，它的顶点数比维数多 1，两因素组成的单纯形是一个三角形，三因素组成的单纯形是一个四面体，n 个因素组成的单纯形是一个由 $n+1$ 顶点构成的超多面体。在优化实验中，每一个顶点代表一个试验点。按照每个试验点所确定的试验条件进行实验，以试验效果最差的试验点（顶点）为反射基点，依据图形对称性原理沿该点与单纯形的形心点的连线方向作等距离（固定步长）的反射，得到新的试验点。以留下的试验点与新的试验点组成新的单纯形，再在新试验点进行实验，同样地，再以试验效果最差的试验点（顶点）为反射基点，沿该点与新单纯形的形心点的连线方向作等距离（固定步长）的反射，又得到一个新的试验点，组成新的单纯形。依此类推，不断地推移单纯形，直到所得到的效果最好与效果最不好的试验指标值的差值小于实验误差或事先规定的允许差为止，单纯形停止推移。最后获得最佳的试验条件。如图。



基础标准 basic standard 具有广泛的普及范围或包含一个特定领域的通用规定的标准。它在一定范围内作为其他标准的基础而普遍使用，是制订其他标准的依据。如计量单位、技术术语、图形符号、文件形式等标准。

基底电解质 base electrolyte 又称底液。是指除支持电解质之外，还含有 pH 缓冲剂、螯合剂等的电解质溶液，该溶液在所研究的电位范围内是非电活性的。

基峰 base peak 在质谱图中的质量范围内，强度最大的离子峰称基峰。如果谱图的纵坐标用相对强度表

示，则基峰的相对强度为 100% ，其他离子峰的强度以相对百分数表示。

基流 background current or base current 在气相色谱中纯载气通过检测器时所产生的信号。基流的检测信号主要是来源于载气中的微量杂质。在电子俘获检测器中，载气电离后形成的起始电流也称为基流。参见**电子俘获检测器**条。

基频谱带 fundamental frequency band 在红外光谱中由基态跃迁到第一振动激发态所产生的吸收谱带。基频吸收一般在 $4000cm^{-1}$ 与 $200cm^{-1}$ 之间。

基态 ground state 所有电子都处在其可能能级中的最低能级的原子状态。处于基态的原子是最稳定的，电子吸收能量被激发到较高能级，形成激发态。在正常的温度下，一部分原子总是处于激发态，其数目 N_i 由波耳兹曼关系式决定。

$$N_i = \frac{g_i}{g_0} N_0 \exp\left(-\frac{E_i}{kT} \right)$$

式中，N_0 是原子在基态上的布居数；g_i 和 g_0 分别是激发态和基态的统计权重；E_i 是激发态能量；k 是波耳兹曼常数；T 是光源温度。

基态二聚体 dimer 两个同种分子在浓度升高或在特定介质中因客体分子诱导结合形成的复合物。在发光分析中，dimer 指基态二聚体。如羧酸或染料分子通过氢键以及其他分子间作用力形成的 2 分子简单会合体。芘分子的基态二聚体的荧光发射光谱在 470nm 前后呈现无结构特征的宽峰，其激发光谱与单体的激发光谱不能重叠。利用二聚体与单体分子发光强度之比进行分析的方法称为比率法（ratiometric detection），比利用单峰测定的常规方法测定的精密度要高。

基体 matrix 又称基质。是试样中除被测元素（组分）之外的其他整个组分。基体对被测元素的行为有时有重要影响，为消除基体的影响，常采用标准加入法分析被测元素。当采用标准曲线法分析被测元素时，需要在标准样品（溶液）系列中匹配与被分析试样中所含等量的基体或主要组分。

基体标准物质 matrix reference material 其基体和被测样品的基体相同的标准物质。大多数标准物质都属于这一类，用这种标准物质校准测量器具、评价测量方法或确定物料特性量值，可以获得最佳的效果。参见**标准物质**条。

基体改进 matrix modification 在进行石墨炉原子吸收光谱分析时，在复杂试样中加入某种物质使基体转化为易挥发的化学形态或将待测元素转化为更加稳定化学形态的操作技术。1973 年埃迪格（R. D. Ediger）等首先使用硝酸铵作为基体改进剂来降低氯化钠对测定镉和镉的干扰。氯化钠（沸点 1413℃）转化为硝酸钠和氯化铵，氯化铵、硝酸钠和过量的硝酸铵在灰化阶段于 <500℃ 被除去。基体改进的作用在于：（1）分析物与基体改进剂作用生成高熔点盐、氧化物、金属间化合物，降低分析物的挥

发性，以便使用更高的灰化温度除去基体；（2）增加基体的挥发性，以促使基体在分析物原子化之前除去，降低背景吸收；（3）阻止或避免分析物生成难熔化合物、降低记忆效应；（4）形成强还原性环境，改善原子化过程；（5）改善基体的物理特性，阻止分析元素被基体包藏，减少凝相和气相干扰。

基体改进剂　matrix modifier　在进行石墨炉原子吸收光谱分析时，加入到复杂试样中借以改善基体与被测元素物理化学特性和行为的物质。它分为：（1）无机基体改进剂，常用者有硝酸铵、磷酸氢二铵、镍、钯等，特别是钯已作为通用基体改进剂获得广泛的应用；（2）有机基体改进剂，常用者有抗坏血酸、EDTA、酒石酸、柠檬酸等；（3）双基体改进剂，将无机和有机基体改进剂相互组合起来使用，如（钯＋抗坏血酸）、[$Pd(NO_3)_2$ + Triton X-100] 组合为双基体改进剂使用；（4）活性气体改进剂，常用者有氧气和氢气。

基体校正　matrix correction　考虑影响X射线强度与基体成分之间关系的各种因素，将X射线强度换算成浓度而做的一种校正。它包含原子序数校正Z，吸收校正A和荧光校正F，因此简称为ZAF校正。

基体匹配　matrix matching　在原子光谱分析中，为消除基体效应，往标准样品（溶液）系列中加入与被分析试样中所含等量的基体或主要组分的操作。如在火焰原子吸收光谱分析中，配制基体匹配的标准系列样品溶液，可以消除基体对样品雾化进样效率、气溶胶粒度分布、蒸发和原子化过程的影响。基体匹配是消除基体干扰的有效方法之一。

基体吸收与增强效应　matrix absorption and enhancement effects　X射线荧光光谱分析中的一种基体效应。主要包括：（1）原级X射线进入样品时所受的吸收效应；（2）待测元素发射的荧光谱线受样品的吸收和待测元素受样品中其他元素发射的次级X射线的激发；（3）第三级的激发效应。以上各级吸收和激发效应，都会随着样品基体化学组成的差异而发生变化，是造成X射线荧光光谱定量分析误差的重要原因。

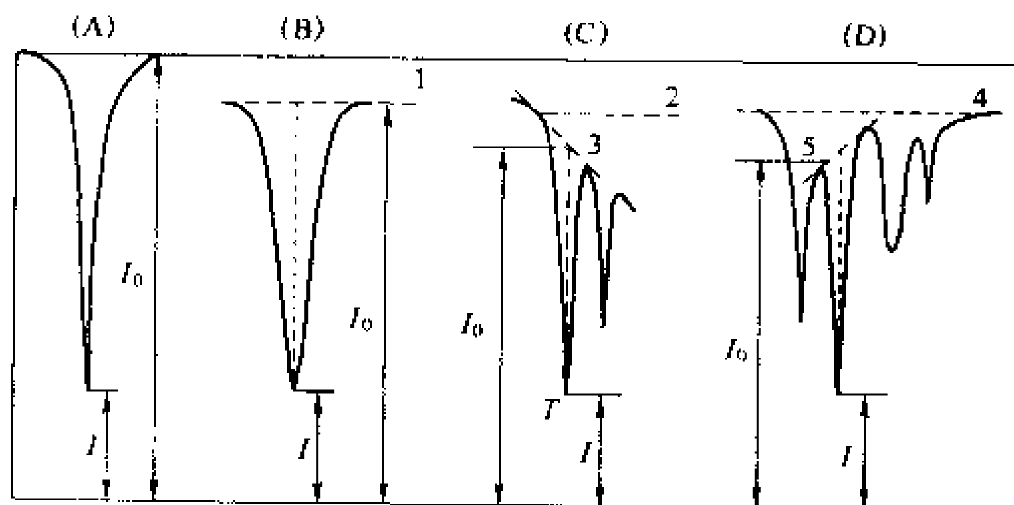
基体效应　matrix effects　试样的基本化学组成和物理化学状态的变化，对待测元素定量分析结果所造成的影响。基体效应包括改变被测元素的蒸发特性、元素分子的不完全解离或已原子化的原子重新复合，导致被测元素以分子形式逃逸测量区，以及大量基体分子存在造成的散射及对分析谱线的吸收等影响。例如：在X射线荧光光谱法中，样品基本化学组成的差异将引起对原级和次级X射线的吸收与增强效应的不同而影响分析谱线的强度。而样品的物理化学状态，则包括固体粉末的粒度、样品表面的光洁度或粗糙度、样品的均匀性以及元素在样品中存在的化学状态等对分析谱线强度的影响。所以，基体效应在X射线荧光光谱法中是造成

元素定量测定分析误差的主要原因之一。

基团频率 group frequency 具有相同基团的化合物在红外光谱中都在一较窄的频率区间呈现该基团的吸收谱带，此吸收谱带的频率称为基团频率。基团频率主要由其原子的质量及原子间的力常数所决定，但分子内部结构和外部环境的改变都会使其频率发生变化，因此它不是一固定值，而具有一定频率范围。它是用来进行定性分析与确定分子结构的依据。人们已汇总并绘制出各种基团的频率表，随时可供参考。参见**官能团区**条。

基线 baseline 在色谱分析中，当只有流动相通过而没有样品通过检测器时，记录所得到的检测信号随时间变化的曲线，正常情况下应为一条直线。参见**保留时间**条。

基线法 baseline method 为了消除两个吸收池的不匹配、杂散光引起的背景吸收所产生的误差和相邻吸收谱带叠加的干扰，以测得谱带的真实强度，简化定量分析中的计算手续，可以采用基线法来扣除该分析峰不存在时的背景吸收线，用以代替记录线上的100%透过率线。如下图所示，基线画法主要有四种。（A）为正常理想的谱峰，背景为 $T=100\%$ 作为 I_0；（B）分析峰不受其他峰干扰时，背景基线为1；（C）分析峰受到附近峰干扰时，可用单点水平基线2，也可用3线作为基线；（D）分析峰与干扰峰紧挨在一起，若浓度改变，干扰峰的峰肩位置变化不太大时，可用4线或5线作为基线。究竟采用哪一种基线合适，需根据实际测得的结果和画出的定量曲线来判断。



基线法

基线校正 baseline correction 从谱中扣除所得的校正基线函数，得到基线比较平直的谱图的过程。通常光（波）谱图皆已数字化，即由一系列以频率为变量的吸收强度值组成。实测的光（波）谱图由于样品颗粒的散射、载样窗片不平整、仪器的局限性或者实验所选用的参数不妥而造成

谱图基线的漂移、倾斜或弯曲。利用谱仪所提供的基线校正软件可对谱图进行水平、斜度和弯曲校正。它是通过一些数学方法进行的。可以设定直流偏置和斜率两个参数，构造一个线性基线校正函数。如根据下述方程可以校正每个频率处的基线：$Y'(\bar{\nu}) = Y(\bar{\nu}) - (T + C \cdot \bar{\nu})$，式中，$Y(\bar{\nu})$是原图中频率 $\bar{\nu}$ 处的纵坐标（吸收强度）值；$Y'(\bar{\nu})$是相应的校正后的纵坐标值；T 是与基线漂移有关的直流偏置数值；C 是与该基线斜率有关的数值。如果整个光谱只需做水平校正，则 $C = 0$、T 为常数；如果只做斜度倾斜校正，则 $T = 0$、C 为常数；如果同时做水平与倾斜校正，则 T 与 C 均不为0；如果这部分光谱呈弯曲状，则可通过逐步改变 T、C 数值达到校正的目的。此外也有采用多项式基线校正函数，如利用三次多项式依次一一拟合连续四个点的基线，直至遍及整个所选区域上的基线为止。

基线宽度 baseline width 自色谱峰两侧的拐点作切线，与基线相交的两点之间的距离，以 W 表示。它与标准偏差的关系为 $W = 4\sigma$。参见**标准偏差**条；参见**保留时间**条。

基因 gene 指 DNA 分子中，具有一定长度，能编码一条多肽链，严格说，一个基因包括 4 个区域：（1）前导区（leader），位于编码区的前面，相当于 mRNA 起始密码 5′端的非翻译序列；（2）尾部区（trailer），位于编码区之后；（3）内含子（即插入序列），位于编码序列之间；（4）外显子（即编码序列），负责编码肽链。人类基因组约含 10 万个这类基因，其平均长度为 1Kb 左右。在高等真核生物中，除编码多肽链的基因外，还存在其他两类主要的基因：编码核糖体 RNA（rRNA）基因和编码转移 RNA（tRNA）基因。这两种 RNA 在蛋白质生物合成中起重要作用。

基因操作技术 gene manipulation techniques 对基因组或基因进行切割与拼接，或将一特定基因片段从一个物种转移至其他物种中，或人工合成基因并将其转移至一特定细胞中去的所有操作技术。外源 DNA 必须整合到宿主基因组中才能复制和遗传下去，否则将会逐渐消失。基因载体，如质粒、噬菌体和病毒等都具有复制起始点，本身就是一个复制子，将外源性基因插入载体，可在宿主细胞内复制。外源基因片段与载体重组的方法主要有 3 种：（1）黏性末端连接法，用限制性内切酶将外源基因和载体切割成具有互补序列的黏性末端，再用大肠杆菌 DNA 连接酶修复和封闭相邻核苷酸间的单链缺口，形成完整的双链；（2）人工接头平头连接法，将黏性末端补平或削平，或直接利用某些限制性内切酶形成的平头末端，在 T_4DNA 连接酶的作用下连接成双链，平头末端连接经常因重组体中无合适的酶切点而需要在平头末端加上人工接头；（3）同聚物接尾连接法，即采用互补同聚物序列退火，将低聚 dA 序列加到一种 DNA 片段的

3′末端，同时将低聚 dT 序列阻断另一种 DNA 分子的 3′末端，将这两种分子退火连接形成混合的二聚环状分子。

基因库 gene pool 一个有性繁殖的生物群体中各成员所具有的全部遗传信息。一个完整的基因库应是一特定物种所具有的遗传信息的全部含量或全部基因的总和。为了维持物种的稳定，基因库决定了某一物质的遗传物质在自然条件下只能在该物种内相互作用，维持和进化发展。

基因诊断 gene diagnosis 基因诊断属于全新内容、全新技术和全新概念的临床诊断方法，是近年来分子生物学和分子遗传学技术发展的成果。传统的疾病诊断方法有 3 种：临床学诊断、血清学诊断和生化学诊断。这些诊断方法都是以疾病的表型改变为依据。现已知道，表型的改变在很多情况下不是特异的，出现的时间往往较晚，因此易延误诊断。随着基因知识的迅速增加，人们明白基因作为生命的物质基础，其结构与功能的改变会导致表型改变，因而直接探查基因的存在状态有可能对疾病作为诊断，这种在基因水平上对疾病进行诊断称为基因诊断、DNA 诊断或基因探针技术。1978 年，美国科学家首次采用羊水细胞对胎儿进行血红蛋白病的产前基因诊断，获得了成功。基因诊断具备了高亲和性、精确性、灵敏性和可行性等优点。不仅可对某些疾病做出确切诊断，也能确定与疾病相关的状态，如对疾病的易感性、发病类型和阶段以及是否具有抗药性等状态的确定。

基因诊断以基因为探查对象，因而具有其他诊断方法所不具备的特点，归纳起来主要有：（1）属病因诊断，针对性强，由于所应用的技术方法具有很高的特异性，诊断准确率极高；（2）由于探针带有“标记”，能被敏感地测出，故诊断灵敏度很高，仅需微量待测样品，一般为 pg 水平；（3）由于基因探针可为任何来源，任何种类，其序列可为已知也可为未知，其检测目标可为一个特定基因也可为一组特定的基因组合，可为内源基因也可为外源基因，所以适应性强，诊断广泛；（4）被检测的基因是否处于活化状态对基因诊断来说并不重要，因此可对那些具有组织和分化阶段特异性的基因及其异常进行检测和诊断；（5）在感染性疾病的基因诊断中，不仅可检出正在生长的病原体，也能检出潜伏的病原体，既能诊断既往感染，也能诊断现行感染。对那些不容易体外培养（如产毒性大肠杆菌）和不能在实验室安全培养（如立克次体）的病原体，基因诊断对这些病原体的检出具有独特的意义。

基因组 genome 某种生物全部染色体的遗传物质的总和。以全长 DNA 的碱基对数表示它的大小。不同生物其基因组 DNA 的大小、所含编码 DNA 的百分比和复杂性不同，进化程度越高者其基因组越复杂。基因组 DNA 上排列着基因，使成有规

则的组织，但其中只有约15%的基因在成体中经常表达，其表达量和速度具有不同的控制机理。大多数真核生物编码蛋白质的基因是不连续的，含有不编码的内含子、是单拷贝基因。真核基因组DNA含有不同类型的重复序列，有的重复序列可形成回文结构、发夹结构和十字形结构等特殊结构、发挥着特殊的生物学功能。

基质 substrate 一般将在酶作用下发生变化的分子或化合物称为这种酶的基质。酶是具有催化作用的物质，被酶作用的物质就是基质。酶对基质分子的结构具有特异识别选择性。通常酶以其基质命名，如能使苹果酸氧化的酶称为苹果酸脱氢酶等。生物体内酶反应是连续进行的，第一个酶反应的产物就是第二个酶反应的基质，如此连续进行着代谢过程。因此研究生物体内各种基质具有重要意义。在固体基质室温磷光分析中所指的基质其含义则完全不同，其作用是使磷光体刚性化。这种基质常为滤纸、硅胶、纤维素膜等。而色谱固定相的基质又称载体（或担体），通常制备成数微米至数十微米粒径的球形颗粒，它具有一定的刚性，能承受一定的压力，对分离不起明显的作用，只是作为功能基团的载体。

基质辅助激光解吸电离 matrixassisted laser desorption ionization; MALDI 利用对使用的激光波长范围具有吸收并能提供质子的基质（一般常用小分子液体或结晶化合物），将样品与其混合溶解后形成混合体，在真空下用激光照射该混合体，基体吸收激光能量，并传递给样品，从而使样品解吸电离。它的特点是准分子离子峰很强。通常将它用于飞行时间质谱，特别适合分析蛋白质和DNA。

基质辅助激光解吸飞行时间质谱仪 matrix assisted laser desorptionionization-time of flight mass spectrometer; MALDI-TOF MS 配置基质辅助激光解吸电离源的飞行时间质谱仪。把样品悬浮在基质中，激光打在基质上，基质吸收并传递激光能量，使基质中的样品解吸并电离，进入飞行时间质谱仪进行检测。它是用来进行生物大分子分析的较好手段。

基质隔离技术 matrix isolation technique 一种冷冻技术。将气体或蒸汽样品与稀释气体（也称基质气体）混合后，再冷冻在窗片或镜面上进行光谱学研究。有人在基质隔离技术与傅里叶变换红外光谱联用的基础上发展了GC/MI-FTIR（GC/matrix isolation FTIR）技术，用冷冻收集盘代替光管作为GC和FTIR的接口，基质气体常用Ar或N_2，与样品的摩尔数比为$10^4 \sim 10^6$: 1。一般用来测定不稳定物的红外光谱，将不稳定物（如自由基等）喷射到能够透射红外光的低温（4.2～15K）窗片上，与此同时，用另一支喷枪将过量的基质隔离气体射向窗片，从而使各个不稳定的分子被基质隔离气体分别隔开，并一起在窗片上冷凝，这时不稳定物分子失去了再反应的条件，因此可以稳妥地进行红外光谱测定。

基质固相分散提取法 matrix solid phase dispersion method 简称 MSPD 法。1989 年，由 Steven A. Arker 首次提出，用于分离牛肉组织中多种农药残留物和兽药残留物。采用碳-18 固体与样品组织混合形成半干的均匀混合物，然后放在空的 10ml 注射器中，用少量溶剂洗脱后进行色谱分析。碳-18 起吸附蛋白、脂肪和色素的作用。该法多用于肉组织中多种农药残留物和兽药残留物的分离，与固相萃取（SPE）比较，优势在于避免了溶剂提取、沉淀组分和样品离心等步骤。

基准试剂 primary reagent 化学组成恒定、纯度高、稳定性好，可直接用来配制或标定标准溶液浓度的一类化学试剂。常用的基准试剂有银、铜、锌、铝、铁等纯金属及其氧化物，以及重铬酸钾、碳酸钠、邻苯二甲酸氢钾、硼砂等。

基准物质 primary reference material 由国家计量研究机构用权威（或绝对）方法准确测定其特性量值，并给出了包括物质变动性在内的总不确定度的估计值的标准物质。其特性量值的总不确定度应达到最高水平。目前国际上公认的基准物质有：用库仑法定值的纯度标准物质，用同位素稀释质谱法定值的无机痕量元素标准溶液，用质量法准确配制的标准气体等。基准物质是量值传递的依据。在分析化学中可直接用来配制标准溶液、标定溶液浓度和仪器。基准物质必须具备下列条件：物质的组成应与其化学式相符，若含结晶水，其结晶水的实际含量亦应与其化学式严格相符；纯度足够高，杂质含量应低于分析方法允许的误差限；稳定性好，例如不吸收空气中水分和 CO_2，不分解，不被空气氧化等；参加反应时严格按反应式定量进行等。

畸变峰 distorted peak 是指反常形状色谱峰的统称。在色谱分离过程中，分配等温线呈非线性时或操作条件不当时，就会出现前延峰或拖尾峰。如进样量过大，信号超过记录器满标度值时，会出现平顶峰。在用热导检测的气相色谱中，当载气与组分的热导率相近时，二者混合物的热导率随组分浓度的变化有时不呈线性关系，而随热导池的温度和通过电流的大小而不同，如果操作条件选择不当，有可能出现 W 峰形或反峰。

激发 excitation 处于基态的原子、分子或离子经碰撞或吸收辐射获得能量后跃迁到高的电子能级、振动能级或转动能级的过程。被激发后处于激发态的粒子一般都很快回到基态或发生分解，如果是禁阻跃迁（如激发三线态）则寿命较长，为亚稳态。光激发后一般会发生光辐射（荧光或磷光）、光化学反应或光增敏等。

激发电位 excitation potential 使原子或分子从稳定的能级跃迁到高能级所需的电位。激发电位一般可表示为电子能量，以电子伏特（或千电子伏特）为单位。每个元素都有对应于各能级的激发电位。对于每一元

素，越靠近原子核的能级的激发电位越大；对于同一能级，激发电位随原子序数 Z 增大而增大。对于某一能级如K，以电子伏特为单位的激发电位 V_K 与以 Ù（1Ù＝0.1nm）为单位的X射线吸收限 $\lambda_{K吸收限}$ 的关系式为

$$V_K = \frac{12400}{\lambda_{K吸收限}}$$

激发光谱 excitation spectrum 以各种不同波长的单色光激发发光体，测定一定发光波长下发光强度随激发波长变化的曲线称为激发光谱。激发光谱反映了不同波长激发光引起的发光的相对效率。激发光谱可供鉴别发光物质，在进行发光测定时需选择适宜的激发波长。一般激发光谱与吸收光谱大致相同，随激发态各能级间能量转移机理的不同有时也会有很大差异。

激发光源 excitation light source 是光谱分析时提供分析物蒸发、原子化和激发所需的能量的装置，其作用是产生元素的特征发射光谱。常用的激发光源有火焰、电弧、电火花、电感耦合等离子体、辉光放电等。

激发态 excited state 通常情况下，原子处于基态，在激发光源作用下，原子获得足够的能量，电子由基态跃迁到较高的能量状态即激发态。处于激发态的原子是不稳定的，寿命小于 10^{-8}s，其外层电子将从高能级向较低能级或基态跃迁，并以光子或其他形式释放能量。

激光 laser 激光是由激光器发射出来的光，是一种受激发射。laser 是"Light amplification by stimulated emission of radiation"的首字母缩写词，该词是在1964年的全国第三届受激光发射学术报告会上，根据钱学森教授的提议定名的。它是被其他辐射感应而发生的辐射，故也称感应辐射。具有以下的特征：（1）方向性好，几乎是一束平行光束，基本上沿一条直线传播，发散角可达毫弧度水平；（2）单色性好；（3）光束细，功率密度特别大，亮度非常高。

激光电离光谱 laser ionization spectroscopy 由激光诱导产生的电离光谱。用它可研究光与物质的相互作用获得物质结构的信息。参见**激光共振电离光谱**条。

激光共振电离光谱 laser resonant ionization spectrum 一种利用激光技术进行超痕量分析的分析方法。激光共振电离光谱（LRIS）最早出现于1974年。它是利用脉冲激发器使分析元素的原子从基态跃迁到激发态。激发态原子的受激电子回到基态之前，可以从同一激光源或另一激光源吸收足够的能量进行电离，产生一个自由电子和一个正离子，可被能对单个电子或正离子产生响应的仪器检测。LRIS技术通过一些电离机制可检测除了氦、氖以外的所有元素。

激光光谱电化学法 laser spectroelectrochemistry 激光光谱与电化学相结合用于研究和表征电化学反应、机制以及分子结构等信息的方法。它包括电化学现场激光拉曼光谱法等。

激光光热光谱 laser photothermal

spectroscopy 采用激光作为激发光源。当一束特定波长、具有高斯强度径向对称分布的激光入射于样品池时，样品吸收光辐射产生受激态，受激态通过无辐射弛豫过程，部分或全部以热能形式释放出所吸收的光能，对样品产生加热作用。由于入射光束的截面强度分布是高斯型的，样品中光束辐照区域内产生的热也是高斯型梯度分布的。热梯度导致样品或与样品邻近的介质折射率的梯度分布。这种折射率梯度分布犹如在样品内部或样品界面附近形成了类似于透镜、棱镜或光栅的光学元件。如果有另一光束通过所形成的类光学元件时，其传播方向就会受到微扰，导致光束发散、偏转或衍射，这种现象称为光热效应。测量这种光热效应所得到光谱称为激光光热光谱。它分为两类：光热偏转光谱与光热透镜光谱。基于光热效应测量的仪器称为激光光热光谱仪。一般情况下，光热光谱仪输出的信号强度正比于入射于样品上的激发光束功率。利用激光的高功率，可以得到高灵敏度。

激光光热检测器 laser and light heat detector 当一束激光入射于样品时，样品吸收激光产生受激态，伴随受激态的无辐射弛预，对样品产生加热导致温度梯度分布，在加热区域伴随产生折射率的变化。如果有另一束光束通过该样品区域，其传播特性就会受到微扰，产生光束的发散或偏转，前者叫激光热透镜效应，后者叫激光光热偏转效应，总称激光诱导光热效应。在一定条件下，激光光热信号与样品吸收和激光强度成正比。

激光光热偏转光谱 laser photothermal deflection spectroscopy 采用激光作加热束，在样品内或与样品相邻介质中产生折射梯度分布，使通过其中的探测光束传播方向偏转，产生光热偏转效应。测量这种光热偏转效应所得到光谱称为激光光热偏转光谱。

激光光热衍射光谱分析法 laser photothermal diffraction spectrometry 采用激光作加热束，在样品中产生热光栅。探测束通过热光栅时产生衍射效应。测量这种热透镜效应所得到光谱的光热光谱分析法称为激光光热衍射光谱分析法。相应的仪器称为激光光热衍射光谱仪。

激光光热折射光谱分析法 laser photothermal refraction spectrometry 是激光热透镜光谱法的特例。采用激光作加热束，在样品中产生类似一个柱透镜的光学元件，称为交叉束热透镜。测量这种交叉束热透镜效应所得到光谱的光热光谱分析法称为激光光热折射光谱法。相应测量的仪器称为激光光热折射光谱仪。

激光光声光谱 laser photoacoustic spectroscopy 当物质受激光照射，再通过无辐射跃迁返回基态时，常会将激发能转变为热能，使样品温度升高，经调制而形成热波，热能再激发出声波来，通过声敏元件检测光谱信息，这就是激光光声光谱。目前光声光谱在研究大气污染和痕量气体的分

析中，已有很成熟的技术。如 CO_2 激光光声光谱仪，对氯乙烯、六氟化铀、氟里昂等气体的检测可达 $\mu g \cdot L^{-1}$ 量级的水平。对于绝缘体、半导体、金属材料以及有机高分子材料，光声光谱可直接测得这些材料有关光吸收带的信息。

激光光声光谱法 laser photoacoustic spectrometry 以激光作为激发光源，将调制好的光辐射，透过窗口投射到密封于光声池内的样品上，样品吸收光辐射能量，样品分子被激发到激发态。处于激发态的样品分子以非辐射跃迁方式去活化，将吸收的能量转化为热能，使样品温度升高，经调制而形成热波。这一周期性的热波引起密封的光声池内气体产生振动形成声波，用微音器接收，并转为电信号，经前置放大器放大而送到计算机或其他检测设备上，这样即获得了样品的光声光谱。利用光声光谱分析的方法称为激光光声光谱法。

激光激发原子荧光光谱法 laser excited atomic fluorescence spectrometry; LEAFS 以激光为激发光源的原子荧光光谱法。以火焰和电感耦合等离子体为原子化器时，一般采用激光器为泵浦，工作比较可靠，平均输出功率可达 600W，脉冲重复频率约为 50Hz。用石墨炉做原子化器时，宜选用重复频率较高的准分子激光器作为泵浦，以减小过低脉冲重复频率引起的背景扣除误差。采用激光光源，激光强度大，激发速度快，易引起光学饱和现象，此时荧光信号不再取决于量子效率。通常采用可以达到光学饱和的最低激光强度或检测非共振荧光，以消除散射光的影响，提高信噪比。参见原子荧光光谱法。

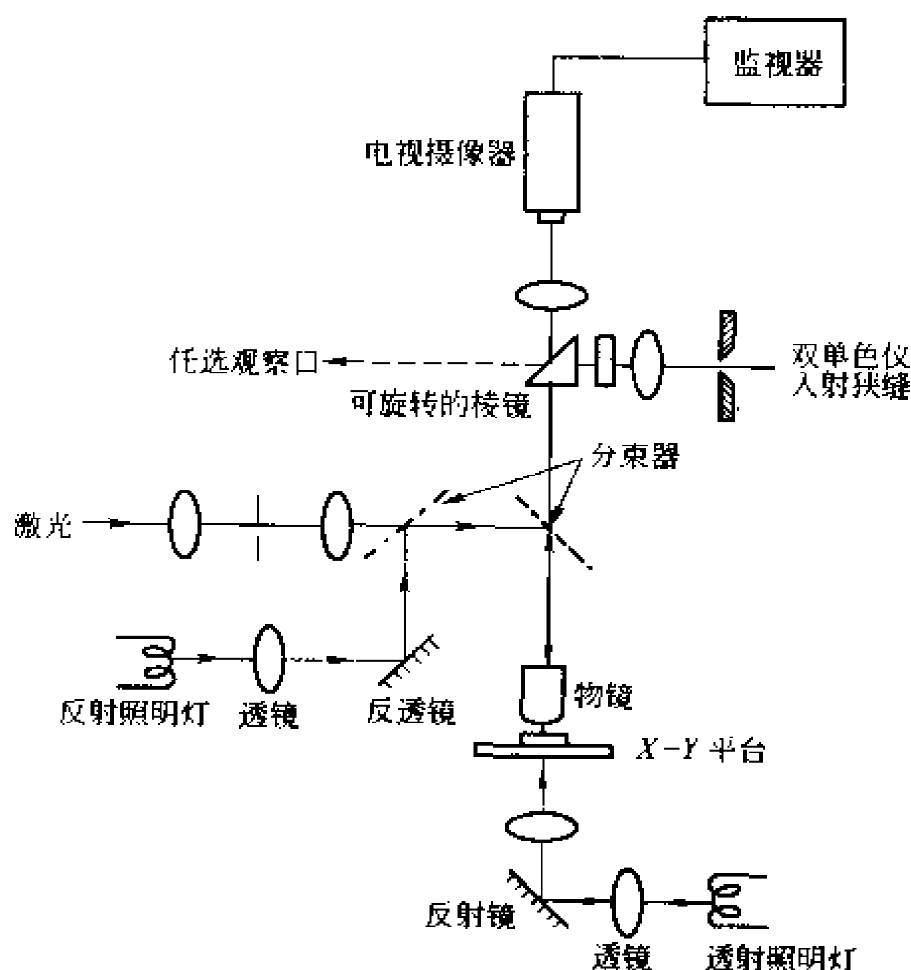
激光解吸电离源 laser desorption ionization source; LD 用于质谱仪的一种结构简单、灵敏度高的电离源。脉冲激光经透镜系统聚焦到涂有有机化合物溶液样品的靶上，化合物分子在激光束照射下解吸电离。20 世纪 80 年代后期，又发展了基质辅助激光解吸电离源，将底物引入了激光解吸电离源，大大提高了灵敏度和选择性，实现了生物大分子分析的重大突破。

激光解吸质谱法 laser desorption MS; LDMS 分析非挥发性化合物的最常用的方法之一。激光可看作是光子枪，用光子轰击样品，产生样品离子。激光可置于质谱仪离子源，采用脉冲方式，强度大，易于聚焦在样品的特定表面。它是傅里叶变换质谱和时间飞行质谱的理想离子化方法。用激光轰击样品，常得到样品分子与钠钾离子的加成离子。碎片离子的产生与激光功率及样品性质有关。

激光拉曼光谱分析 laser Raman spectrometry 基于拉曼散射效应的一种分子光谱分析方法，是研究分子结构的重要手段之一。拉曼光谱是一种散射光谱，拉曼散射效应（参见**拉曼散射**条）是拉曼光谱的物理基础。拉曼光谱是一种分子振动转动光谱，自 1960 年将激光这种新型光源引入拉曼光谱后，激光拉曼光谱分析

已广泛应用于有机、无机、高分子、生物和环境等各个学科领域，与红外光谱相配合，成为分子结构分析的有力工具。物质（分子）的拉曼位移（即激光的入射频率和散射频率之差），一般地讲，与入射频率无关，它与物质（分子）的振动有着特征的对应关系。因此，拉曼特征频率是拉曼光谱分析进行定性鉴定的依据。而从激光拉曼光谱分析所得的谱图上，谱带频率（即拉曼位移）、谱线形状和光谱强度则把分子振动与基团所处的化学环境都联系在一起了，这是进行分子结构分析的重要信息。实践中，虽然拉曼光谱与红外光谱产生的机理不同，但它们同属分子光谱，在分子结构分析时，它们是互相补充的。

激光拉曼微区探针 laser Raman microprobe 是获得显微拉曼光谱的重要仪器附件。该附件由光学显微镜、电视摄像机和监视器组成。适用于测定不均匀的材料和矿物等的拉曼光谱。装置如下图。



显微拉曼光路图

激光裂解器 laser pyrolyzer 以激光作为高温能源的裂解器，它的工作原理是：由红宝石（或铷）固体脉冲激光器（或二氧化碳激光器）发

出激光束，经透镜聚光后射到盛放样品的石英管上，样品通过多光子吸收或电子隧道效应，吸收一部分激光光能，使样品迅速裂解为小分子碎片，进入色谱柱进行分离、分析。这种激光裂解器到达平衡温度的时间很短，二次反应少，但热解温度的控制和测量较困难，样品的色泽、透明度和表面状况等对实验结果有很大的影响。

激光器 laser 基于受激辐射原理使光在某些受激发的工作物质中放大或振荡发射的器件。激光器是两端有平面镜或球面镜的一个空腔，腔内充以可激发的材料（如晶体、玻璃、液体、染料或者气体等任意材料），其中的部分粒子可能被激发（光激发、放电激发、化学激发或热激发等）到能量较高的状态，当这种状态的粒子数大于能量较低状态的粒子数时（粒子数反转），由于受激辐射作用，该材料就能对某一定波长的光辐射产生放大作用，当这种波长的光在两块反射镜之间往复振荡时，多次通过工作物质，使光辐射被放大了很多倍，而形成一束强度很大，方向集中的激光束。光谱学中常用的激光器包括有：固体激光器、气体激光器、染料激光器、准分子激光器、半导体激光器等。

激光热透镜光谱 laser thermal lens spectroscopy 激光聚焦到样品时，由于光斑中心处温度最高，而周围温度较低。在激光光斑附近就出现了一个中心小而周围大的折射率变化区域，形成一个类似于光学透镜的光热透镜，它是个发散透镜。测量透射过来的入射光的份额，就得到光热透镜光谱。热透镜方法用于痕量离子、微量气体的测量。

激光热透镜光谱法 laser thermal lens spectrum 采用激光作加热束，在样品中产生类似透镜的光学元件，称为激光热透镜。测量这种热透镜效应所得到光谱的光热光谱分析法称为激光热透镜光谱法。相应的测量仪器称为激光热透镜光谱仪。

激光色谱 laser chromatography 以激光的辐射压力为驱动力，将待分离组分（或物质颗粒）按几何尺寸大小予以分离的一种色谱分离技术。欲分离的粒子随流动相（粒子溶液本身）以一定的流速流经一个内径为200μm左右的毛细管，将一定功率的激光束聚焦于毛细管的出口（流动相流出口），激光束的入射方向与粒子在流动相中的流动方向相反，但都与毛细管同轴。这时，溶质粒子同时受到流动相的推动力和与之相反的激光束辐射压力的作用。由于溶质粒子的折射率大于溶剂的折射率，因此溶质粒子受激光辐射压力作用而聚焦于激光束的中心线上，当溶质粒子受到的激光辐射压力大于流动相推力时，溶质粒子就会发生反转并获得一定加速度，沿激光束中心线运动，直至所受到的流动相阻力与激光辐射压力相等时，溶质才会停留。因为不同几何尺寸的溶质粒子受到激光辐射的作用力不同，它们在毛细管中的停留位置也就不同，从而达到分

离。可以用配有显微物镜的电视摄像机记录分离结果。激光色谱是1995年刚刚提出的新的色谱方法，尽管尚无商品仪器，但可预言其在生命科学领域将发挥重要作用，如分离高分子聚合物微球、生物细胞、生物大分子、肽、DNA、线粒体。从理论上讲，可以实现单个蛋白质分子的检测。

激光烧蚀 laser ablation 表面分析的一种理想的新技术。采用可调谐激光作波长扫描时，在一个激光脉冲期间，激光脉冲前部分光子烧蚀中性原子，形成了激光烧蚀。在某一扫描波长下，由于与待测元素的某个能级发生共振，中性原子在同一脉冲被多光子共振电离，产生离子的增强。

激光烧蚀共振电离光谱 laser ablation-resonance ionization spectroscopy 采用两个波长不同的激光脉冲分别作激光烧蚀和共振电离。第一个激光脉冲烧蚀样品，产生中性原子，然后经过合适的延迟（通常为微秒级），用第二个激光脉冲产生共振电离，发射各自的特征谱线，这就是激光烧蚀共振电离光谱。

激光时间分辨荧光法 laser time-resolved fluorescence spectroscopy 用激光作激发光源，处于基态或低激发态的原子或分子激发到较高能级后，被激发的原子或分子有一个特征寿命（荧光寿命是原子或分子返回基态之前停留在激发态的平均时间），这个特征寿命一般在纳秒级或更短。在此时间尺度（纳秒级）脉冲激光器易于得到。如果不同原子或分子的荧光寿命有差别，通过时间分辨的方法就可以加以分辨。这种利用激光为激发光源，根据荧光寿命衰变时间特征而进行选择测定的方法称为激光时间分辨荧光法。

激光显微发射光谱分析法 laser micro-probe emission spectrometry 先用光学显微镜选择好样品的微小部位（10~500μm），然后用聚焦的激光光束照射，在极短的时间内（0.5ms），温度上升到5000~6000K（根据物质不同而异），使激光照射的斑点内的物质汽化并部分电离，形成微等离子体，然后由辅助的石墨电极激发出光谱，利用光谱性质和谱线强度进行定性和定量的分析方法称为激光显微发射光谱分析法。

激光显微光谱分析 laser micro-probe spectrochemical analysis 利用聚焦的激光束使试样的微区表面气化，而后激发试样蒸气，发射光谱，从而分析该微区表面的元素成分。可用于岩矿鉴定、金属中夹杂物分析、合金分析研究、细微元件分析、珍贵试料不破坏分析等用途。

激光显微光源 laser micro-probe source 由激光器与光学显微镜组成。主要是利用激光能产生高温且方向性好等优点。通常把用激光显微光源作为激发源的发射光谱仪，称为激光显微发射光谱仪，或称激光探针。激光探针与电子探针和离子探针相比，具有费用低廉，装置简单，操作维修方便等优点，主要用于微区分析。

激光显微原子发射光谱分析法 laser micro-probe atomic emission spectrometry 先用光学显微镜选择好原子的微小部位（10~500μm），然后用聚焦的激光光束照射试样，在极短的时间内（0.5ms），使样品温度上升到5000~6000K，产生原子蒸发，然后由辅助的石墨电极激发出光谱，利用特征光谱及其强度进行定性和定量分析。

激光消融 laser ablation 用强脉冲激光对固体表面照射时，表面被迅速加热并被熔化，因蒸气的激烈释放使固体表面受到侵蚀的现象。

激光遥测 laser telemetering 自动遥测的一种。系将激光光束或电磁波束作为辐射线束，观测辐射在大气或水体中散射、吸收、荧光等作用，以推断其中各种污染物的浓度。激光遥测是激发遥测中最重要的一种，它选用单色性好、强度高的激光作光源，克服了相关光谱遥测无法克服的局限性。激光遥测技术可分为单端系统和双断系统。激光源和接收望远镜放在同一端的叫单端系统。双断系统一般是指激光源和接收望远镜分置两端，也可放在一端而远处设一后向发射器。单端系统和双断系统均可用于各种测定对象。

激光诱导光热光偏转测量 detection of laser-induced light heat and deflexion 探测束离轴入射并与激光束相交于毛细管，光热效应诱导探测光束偏转。用位置敏感检测器在远场监测光束的偏转，得到与吸收成正比的光热偏转信号。

激光诱导光声光谱 laser induced photocaustic spectroscopy 以可调谐激光为光源的光声光谱法。参见**光声光谱法**条。

激光诱导光束干涉检测 detection of laser-induced light beam intervene 探测束束径比毛细管内径大，且离轴聚焦，在远场产生明暗相间的条纹。激光诱导的光热效应对探测束的微扰，使干涉条纹发生周期性位移。

激光诱导毛细管振动测量 laser-reduced capillary vibration detection 一种新的高灵敏度、超微体积分析方法。当强的调制泵浦激光聚焦入射于两端拉紧的毛细管上时，样品中产生的周期性加热导致毛细管中或靠近辐照部分的温度波动。温度波动诱导毛细管局部张力波动，从而引起毛细管按调制频率振动。毛细管在空气中振动发出声波，伴随产生空气密度和折射率的波动，当探测器在紧靠其上方通过时就受到声波偏转。

激光诱导荧光 laser-induced fluorescence 检测激光照射样品后的荧光发射的方法。激光波长一定时测得的样品荧光发射强度的变化称为荧光（发射）光谱；改变激光波长测定荧光强度的变化称为激发光谱。荧光光谱反映了由激光波长决定的激发态能级至基态能级的结构。激发光谱具有与吸收光谱相似的谱图，其强度可用吸收系数与量子产率之积来表征。激光作为激发光，其方向性和单色性都很强，而激光诱导荧光检测的是与该

激发光不同方向、不同波长的发光，因此与其他激光光谱法相比灵敏度高。有报道可以检测至 100 个 · cm^{-3}原子甚至更少。对于大多数分子，则很容易地检测至 10^6 个 · cm^{-3}分子。通过对激光调频，可以选择激发跃迁的始态和终态，因此可以解析十分复杂的分子谱带。采用脉冲激光作为光源测定时间分辨荧光，可以测定荧光寿命、量子脉冲频谱、弛豫现象等。

激光诱导荧光检测器 laser-induced fluorescence detector 激光由一根光导纤维引入，照射检测窗口，再用一根光导纤维沿垂直于激发光和毛细管柱的方向检测样品发出的荧光。该检测器是一种高灵敏度、高选择性的检测器，由激光器、光路系统、检测池和光电转换器件等部分组成。

激光诱导原子荧光光谱 laser-induced atomic fluorescence spectra 用激光作激发光源，使处于基态或低激发态的原子激发到较高能级后，被激发的原子将所吸收的光能又以辐射形式释放，发射特征波长的原子荧光，其强度与原子浓度及辐射源的强度成正比。这种按波长（或频率）次序排列的原子荧光称为激光诱导原子荧光光谱。

激光诱导原子荧光光谱分析法 laser-induced atomic fluorescence spectrometry 是一种超高灵敏度的原子荧光光谱分析法。它是以原子在激光辐射能激发下发射的荧光强度进行定量分析的发射光谱分析法。

激光增强电离 laser enhanced ionization 见激光增强电离光谱法条。

激光增强电离光谱 laser enhanced ionization spectroscopy 是激光光谱法的一种。它是利用激光增强电离（LEI）原理、采用火焰使样品原子化，然后被可调谐的激光束选择性地激发至较高的能级态。受激原子通过热碰撞使电离效率显著增加，产生大量的电子和正电荷离子。通过置于火焰两旁的高压电极收集所形成的离子，便得到光电离信号。经过多年的研究，LEI 技术已趋成熟，而且已扩展到石墨炉、等离子体以及微波等原子化器。多数元素检测限在 ng · ml^{-1} ~ pg · ml^{-1}范围。LEI 检测的是电流信号，具有检测效率高、不受散射光等杂散光背景干扰的优点，是非常有发展前途的激光痕量分析方法之一。

激光增强电离光谱法 laser enhanced ionization spectrometry 是激光光谱法的一种。它是利用激光增强电离（LEI）原理、采用火焰使样品原子化，然后被可调谐的激光束选择性地激发至较高的能级态。受激原子通过热碰撞使电离效率显著增加，产生大量的电子和正电荷离子。通过置于火焰两旁的高压电极收集所形成的离子，便得到光电离信号。经过多年的研究，LEI 技术已趋成熟，而且已扩展到石墨炉、等离子体以及微波等原子化器。多数元素检测限在 ng · ml^{-1} ~ pg · ml^{-1}范围。LEI 检测的是电流信号，具有检测效率高、不受散

射光等杂散光背景干扰的优点，是非常有发展前途的激光痕量分析方法之一。

激基二聚体 excimer 激发态的原子或分子与基态原子或分子结合形成的二聚体。由于激基二聚体在基态时解离，因此可以观察到激基二聚体的发光，却观察不到激基二聚体的吸收光谱。稀有气体双原子分子的二聚体如 He_2，Ar_2，Xe_2 等以及稀有气体的卤化物 KrF，ArCl 等的研究较多，并被作为紫外激光器的介质。多原子分子中，以芘为代表的多环芳烃溶液常常形成激基二聚体。激基二聚体所发出的荧光称为激基二聚体荧光，其波长一般比 0-0 跃迁的单体荧光的发射波长长，并呈现无振动结构特征的宽峰。激基二聚体荧光的寿命与单体荧光寿命大致相同或稍短。还有一种特殊情况是两个三线态分子湮灭形成的激基二聚体，此时的激基二聚体荧光寿命与磷光寿命大致相同，被称为延迟的激基二聚体荧光。

激基复合物 exciplex 又称异核激基二聚体（heteroexcimer）。一种原子或分子的激发态与另一种原子或分子的激态结合形成的二聚体。随溶剂极性增大，激基复合物的荧光发射峰红移。如芘在激发态时本身会形成某种电荷转移配合物，即激基复合物。与激基二聚体以及基态二聚体相似，激基复合物的荧光发射一般与单体荧光相比红移并缺乏振动精细结构。

激素免疫测定 hormone RIA 利用放射免疫测定的原理和方法测定各种激素。

极差 range 又称全距。一组测量值中最大值与最小值之差，记为 R。它只指明了测量值的最大离散范围，未能充分利用全部测量信息，不能精细地反映测量值的分布状况。极差是总体标准偏差的有偏估计值，当乘以校正系数之后，可以用来估计总体标准偏差。其优点是计算非常简单，在数据处理中仍被广泛使用。

极差控制图 R-control chart 用在较长时期内积累的预备数据建立起来的以监控产品特性量值的变动性的控制图。控制图的纵坐标是产品特性量值的极差，横坐标是抽样时间或样本序号，当各个样本容量 n 相同且不大于 10 时，以各样本极差的平均值 $\overline{R}$ 为中心控制线，以 $UCL = D_4\ \overline{R}$ 与 $LCL = D_3\ \overline{R}$ 分别为上、下控制限，绘制极差控制图，其中 D_4 和 D_3 分别是与样本容量有关的系数，可从有关的统计书或手册中查到。极差控制图通常与平均值控制图联合起来使用。

极化 polarization 在不同的学科领域有不同的含义。在电分析化学中是指电流通过电极/溶液界面时，电极电势偏离平衡电势的现象。电流通过时，电极电势偏离平衡电势越大，极化程度越大。一般地，极化现象有两类，即电化学极化和浓差极化。在核磁共振波谱中，由大量基本粒子或原子核组成的体系中粒子可以处于各

自特定的自旋状态，自旋方向不一。在热平衡时，各种自旋方向运动的粒子数几乎相等，且它们在空间的取向是随机的。一旦受到外加静磁场、其他激发场或同时受到它们的作用，或者通过某种反应使各粒子自旋方向在某方向上占优势，粒子数的分布发生变化的现象，称为极化。

极化电极 polarized electrode 面积很小，电解时电流密度很大，易于产生浓差极化的电极。

极化电势 polarization potential 处在极化条件下的电极所表现的电势。通常采用三电极法测定电极的极化电势。在待测电极与辅助电极之间以某种方式通过电流，使待测电极极化。待测电极与一个电势值不变的参比电极组成电池，测量这个电池的电动势。由所测得的电动势减去已知参比电极的电动势，就是待测电极的电势。

极化电阻 polarization resistance 电极电位增量和电流增量之商，表示极化的阻力大小。极化电阻通常是在自然腐蚀电位附近测量。

极化率 polarizability 离子在单位电场强度下产生的偶极矩。极化率可以作为离子可极化性大小的量度，其单位为 $J^{-1} \cdot C^2 \cdot m^2$（焦$^{-1}$·库^2·米^2）。

极化率分量 polarizability component 分子极化率是各向异性的，它是原子坐标的函数，常用一个张量 α_{ij} 来表示（$i, j = x, y, z$）。α_{ij} 在某一象限的大小就叫极化率分量，用矩阵形式可表示为

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{bmatrix}$$

极化曲线 polarization curve 电极电位对电流密度的曲线图。

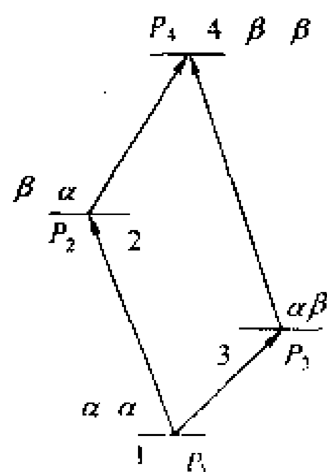
极化调制电子-核双共振 polarization-modulated electron-nuclear double resonance; PM-ENDOR 在常规 ENDOR 中所使用的线偏振射频场的磁场方向，即极化方向上施加低频调制的方法称为极化调制电子-核双共振。与常规 ENDOR 相比，在 PM-ENDOR 中，增加了 ENDOR 峰随低频调制的振幅和相位变化的新信息，即 ENDOR 跃迁又多了两个新的影响因素，所以不仅容易进行 ENDOR 峰的归属指认，而且可以减少解析自旋哈密顿所需的各向异性谱的测量次数。

极化效应 polarization effect 分子极化率发生改变的效应。参见极化率条。

极化增强因子 polarization increase factor 两个磁性核的磁旋比 γ 之比，以 η 表示。通常利用自旋的极化转移可使某核的极化，尤其是丰核（比如^1H）的极化转移给与其相耦合的稀核（比如^{13}C），使稀核的信号增强。对$^1H—^{13}C$ 耦合体系 $\eta = 4$，测量^{13}C 时可提高灵敏度 4 倍。而利用核欧沃豪斯效应（NOE）最多只能提高 2 倍。这对于 γ 小的稀核，如 ^{57}Fe，因^1H-^{57}Fe 耦合，体系 $\eta = 30.95$，对^{187}Os，^1H-^{187}Os 耦合体系 $\eta = 43.42$。所以利用极化转移测定

^{57}Fe-NMR，^{187}Os-NMR 特别有利。

极化转移　polarization transfer　自旋体系在外加静磁场中按不同磁量子数分裂成一系列能级，热平衡态时各能级上的布居数服从玻尔兹曼分布。因光、电、磁等的化学和（或）物理作用，导致自旋体系中的某些能级的自旋布居数偏离了热平衡时的布居数，称为自旋极化。这些能级的自旋布居数，将通过适当的体系内部机制（如弛豫）和（或）外部（如脉冲序列）作用恢复到热平衡状态。如果在这些自旋布居数恢复热平衡值的同时，又导致其他一些能级的自旋布居数偏离了热平衡时的布居数，则称发生了极化转移。自旋极化和极化转移都会导致出现特殊的磁共振现象，通过测量磁共振谱能够得到很多有关结构、能级、弛豫、磁相互作用等重要信息。以自旋量子数为 1/2 的二核耦合体系 IS 为例，按不同的 $|I_zS_z>$ 状态，即 $|\alpha\alpha>$、$|\alpha\beta>$、$|\beta\alpha>$ $|\beta\beta>$ 状态，构成四能级图如下：α 为顺着静磁场方向自旋状态，而 β 为逆静磁场方向的自旋态。热平衡时各



能级上的布居数为 P_1、P_2、P_3、P_4。I 核和 S 核的纵向磁化分别为

$$\langle I_z\rangle \propto \sum_i P_i \langle i|I_z|i\rangle = \frac{P_1 - P_2 + P_3 - P_4}{2}$$

$$\langle S_z\rangle \propto \sum_i P_i \langle i|S_z|i\rangle = \frac{P_1 - P_3 + P_2 - P_4}{2}$$

核的磁化是自旋为 α 态与 β 态布居数的差。$P_1 - P_2$，$P_3 - P_4$ 为 I 核的极化，而 $P_1 - P_3$ 和 $P_2 - P_4$ 属 S 核的极化。若对 I 核施加一选择性 π 脉冲，只使能级 1 与 2 的布居数翻转，即能级 1 的布居数变为 P_2，而能级 2 的布居数变为 P_1。这时 S 核的磁化仍不变，但它的极化却改变了。这种因 I 核的极化而导致与其耦合的 S 核的极化发生变化称为极化转移。对 S 核施加一个 $\pi/2$ 观测脉冲，便可以观测到因极化转移而导致 S 核信号的变化；对于能级 2→4 之间的跃迁的强度是未极化前的谱线强度的 $1+\frac{\gamma_I}{\gamma_S}$ 倍，而 1→3 间跃迁强度则放大 $1-\frac{\gamma_I}{\gamma_S}$ 倍。对 ^{1}H-^{13}C 系统 $\frac{\gamma_H}{\gamma_C}=4$，因此一条谱为原来的 5 倍，另一条为原来的 3 倍，但却是反相的信号。对于 γ 小的稀核，利用极化转移技术可大大增强它们的信号强度。

极谱波　polarographic wave　当外加电压变化达到被测溶液中某物质能在滴汞电极上还原或氧化的电位时，便能观察到明显的电流通过检流计或其他电流测量装置，记录的 S 形的电流-电压曲线。

极谱波方程式　equation of polarographic wave　指极谱波上任一点滴

汞电极的电位与电流的关系式。如

$$E = E^{\ominus} + \frac{RT}{nF}\ln\frac{D'^{\frac{1}{2}}}{D^{\frac{1}{2}}} + \frac{RT}{nF}\ln\frac{\overline{i}_d - \overline{i}}{\overline{i} - \overline{I}_d}$$

即为阳-阴极波方程式。式中，$E^{\ominus}$为该电极反应的标准电极电位；D和D'分别是还原态物质和氧化态物质的扩散系数；$\overline{i}_d$和$\overline{I}_d$分别是阴极波、阳极波的极限扩散电流；E表示极谱波上任一点滴汞电极电位；$\overline{i}$表示极谱波上任一点的电流；n为电极反应的电子转移数；F为法拉第常数；R为气体常数；T为热力学温度。

极谱催化波 polarographic catalytic wave 指极谱电流的大小既不决定于电活性物的扩散速率、又不决定于电极反应的速率，而决定于电极表面反应层内的平行于电极反应的化学反应速率的极谱波，是动力波中的一种，其灵敏度高于扩散波。目前催化波有三种类型：平行催化波、催化氢波和配位体催化前波。

极谱法 polarography 经典极谱法即直流极谱法是1922年捷克化学家Heyrovsky发明的。1918年Heyrovsky从事研究电解质溶液中汞表面张力随电位变化的电毛细管曲线，后来在其装置的线路中串入一灵敏的检流计，研究电流与电位的关系，于是便创立了极谱法，并经数十年的不懈努力，于1959年获诺贝尔化学奖。后来把使用滴汞电极或其他表面周期性更新的液体电极作为工作电极，并根据所得的电流-电压曲线进行定性和定量分析的方法称为极谱法。

极谱极大 polarographic maximum 在极谱图上，电解开始后，电流随电位的增加而迅速上升到一个极大值，然后下降到扩散电流区域，电流恢复正常。这种异常的电流峰称为极谱极大。

极谱极大抑制剂 polarographic maximum suppressor 抑制极谱极大的物质。一般用表面活性物质或染料。

极图 pole figure 在X射线多晶衍射法中，表达材料织构的作图方法。是借助极射赤面投影方法，以材料织构的特定面（如板材的轧面）作为投影面，将材料中各个晶粒的某一指定方向或晶面｛*hkl*｝表示在一张极射投影图上，并将图上极点密度相同处用等密度线连接起来，根据极点密度分布的情况可以判断材料的织构类型和织构度。

极限催化电流 limiting catalytic current 当电极反应的速率随着外加电位的改变而增加时，催化电流达到一个极限值，此时电流值与电位无关。

极限电流 limiting current 当电极反应的速率随着外加电位的改变而增大时，法拉第电流达到一个极限值，称为极限电流。在一定的电位范围内，极限电流的大小与电位无关。极限电流可以是吸附电流、催化电流、扩散电流或动力电流，也可能包括迁移电流。

极限动力电流 limiting kinetic current 当电极反应的速率随着外加电

位的改变而增大时，动力电流达到极限值，此时的电流值与电位无关，这一电流值被称为极限动力电流。

极限扩散电流 diffusion-limited current 当工作电极的电势维持在极限电流区域，这时传质达到电极表面的电活性物质，立刻被还原或氧化殆尽，电极表面附近薄层溶液内的电活性物质浓度趋于零。这时的电流仅受扩散传质过程所控制，不受电极反应（电子交换步骤）或均相溶液化学反应所控制。其值是极限电流与残余电流之差值，与溶液中被测物质的浓度成正比，可作为极谱定量分析的依据。

极限迁移电流 limiting migration current 当电极反应速率随外加电位的改变而增加时，迁移电流达到一个极限值，这个值被称为极限迁移电流。

极限吸附电流 limiting adsorption current 当电极活性物质的还原或氧化速率随着外加电位的改变而增加时，吸附电流能够达到的极限值。此时它的大小与电位无关。

极限真空 limited vacuum 是指真空设备和系统能达到的最好真空状况。可分真空泵的极限真空和真空系统的极限真空，是衡量真空设备和系统的一个重要指标。

极性键合相 polar bonded phase 硅胶表面键合了极性有机基团的固定相。常见的极性有机基团有氨基、二氨基、二甲胺基、氰基、醚基和二醇基等。

极靴 pole-piece of magnet 用软铁做的一种装置，可以产生一个轴对称磁场使电子束聚焦。是电磁透镜中最精密的部分，对电磁透镜的性能有决定性的影响。极靴的缺陷是电磁透镜产生像散的主要原因。

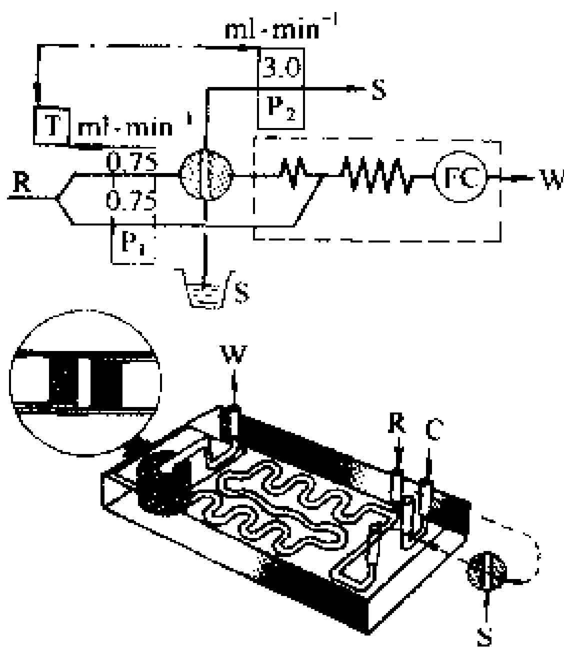
极值 extremum value 在数学上将相应于函数$f(x)$的极大点x_{max}或极小点x_{min}的函数值$f(x_{max})$和$f(x_{min})$称为极值。在异常值检验中，将由于随机因素极端波动而产生的偏差很大的、接近于统计检验临界值但仍在合理误差范围以内的测量值称为极值。极值不是异常值。异常值是落在合理误差范围以外的测量值。

急性经口毒性试验 acute oral toxicity test 指一次或在24h内多次经口给予实验动物受试物后，动物在短期内出现的健康损害效应。其试验方法是，以管试法经口给予各试验组动物不同剂量的受试物，每组用一个剂量（染毒剂量的选择可通过预试验确定）。染毒后观察动物的生物学效应和死亡情况，对试验期间死亡的动物要进行尸检，试验结果后仍能存活的动物要处死并进行尸检。

急性经皮毒性试验 acute dermal toxicity test 指经皮一次涂敷受试物后，动物在短期内出现的健康损害效应。其试验方法是：受试物以不同计量经皮给予各组实验动物，每组用一个剂量，观察动物染毒后的毒性反应的死亡情况。对试验期间死亡的动物要进行尸检，试验结束后仍能存活的

动物要处死并进行尸检。

集成微管道 integrated microconduits 是一种微型的 FIA 流路集成块。由一块塑料板（通常为 70mm × 45mm × 10mm）制成。系将构成流通管道的沟槽压印或雕刻入板中，将槽用压敏胶封闭，或者用类似硅橡胶的弹性底版封闭，使通道的内截面为 0.8mm² 的半圆形。这种集成的做法使诸如反应盘管、接头、注入阀、渗析器、气体扩散装置以及填充柱反应器等集成在一起。其优点是能减小 FIA 系统的总体积和降低样品和试剂的消耗。如下图。



集成微管道流路及集成块示意图

P_1，P_2—蠕动泵；T—定时器；
R—试剂；S—试样；C—载液；
W—废液；FC—流通池
插入部分为光纤式流通池的放大镜头；
虚线区相当于集成块

集光本领 light-gathering power 光谱仪的主要性能之一，表示光谱仪在焦面上产生照度大小的能力。在单色光情况下，

$$照度\ E = \frac{\pi BT\sin\varepsilon}{4} \times \left(\frac{d}{f}\right)^2$$

式中，B 为光源亮度；T 为光学元件透射系数；d 为暗箱物镜直径（以有效孔径计）；f 为暗箱物镜焦距（d/f 为暗箱物镜的相对孔径）；ε 为焦面与光轴的夹角。焦面上的照度与相对孔径的平方成正比。光谱仪的聚光本领一般就以暗箱物镜的相对孔径的平方表示。有效孔径越大，暗箱物镜焦距越短，则聚光本领就越强。摄谱仪的聚光本领随波长而不同，光栅摄谱仪的聚光本领还取决于光栅闪耀角。

集中趋势 central tendency 一组测量值相对集中的程度。测量值是以概率取值的随机变量，各次测量值并不完全相同，呈现某种分布，如分析测试中的测量值通常成正态分布，各次测量值具有一定的离散性，但出现在分布中心的测量值居多数，此即测量值的集中趋势。用来表征此种集中趋势的参数有平均值、中位值和众数，其中用得最多的是算术平均值，它是一组测量值中出现概率最大的测量值。

几何标准（偏）差 geometrics standard deviation 表征一组遵从对数正态分布测量值离散性的特征参数。若一组测量值转换为对数值后遵循正态分布，则其方差

$$\sigma^2_{\lg x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\lg x_i - \mu_{\lg x})^2$$

将 $\sigma^2_{\lg x}$ 取反对数后得到的值 $\sigma^2_g = \lg^{-1}$

$\sigma^2_{\lg x}$，称为几何方差，其方根值 σ_g 称为几何标准（偏）差。

几何平均值 geometric mean 表征一组遵从对数正态分布测量值集中趋势的特征参数。若一组测量值转换为对数值后遵循正态分布，则其平均值

$$\lg \overline{x}_g = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\lg x_i$$

将 $\lg \overline{x}_g$ 取反对数后得到的值 $\overline{x}_g$，称为几何平均值。

几何异构体的鉴别 identification of geometry isomer 利用红外光谱可鉴别几何异构体。对称反式异构体中的双键处于分子对称中心，在分子振动中键的偶极矩变化极小，因此在光谱中不出现双键吸收峰。顺式异构体无对称中心，偶极矩有改变，故有明显的双键特征峰，以此可区分顺、反异构体。不对称的分子，由于反式异构体的对称性比顺式异构体高，因此，双键的特征峰前者弱，后者强。

计量管理 metrological management 为国民经济各个领域中提供计量保证所开展的各项管理工作。从工作性质上可以分为法制的、行政的和技术的计量管理。从工作内容上可以分为计量单位、计量科研、计量法规、计量认证、计量检定、计量器具等管理。

计量监督 metrological supervision 按照计量法律和计量法规的要求所进行的带强制性的计量管理。包括计量单位制的使用，计量器具的检定、制造、修理、销售、进口和使用，计量认证，仲裁检定、调解计量纠纷，对违法行为的处罚等都属于计量监督的范围。

计量检定 metrological verification 为评定计量器具的计量特性，确定其是否合格所进行的全部工作。它的对象包括计量器具和标准物质，其目的是确保量值的统一和溯源性，是量值传递的重要形式和确保计量器具准确一致的重要措施。它是国家对测量的监督，具有法律性。

计量检定规程 metrological verification regulation 对计量器具的计量性能、检定目的、检定方法、检定周期以及检定数据的处理所做的技术规定。包括国家计量检定规程、地方和部门计量检定规程。它是国家法定性技术文件，对计量器具实施的国家监督。是进行技术检定的依据，以确保计量器具准确一致、量值能在允许差范围内溯源到国家计量基准。

计量认证 metrological accreditation 政府计量行政主管部门对向社会提供公正数据的技术机构的计量检定和测试的能力、可靠性和公正性所进行的考核和证明。经计量考核合格、并获得政府计量行政主管部门授权的技术机构，证明其有为社会提供公证数据的资格，由它提供的数据具有法律效力。计量认证合格的单位设有专门的标志。

计时电流法 chronoamperometry 在电分析化学中，通过电位阶跃，记录电流-时间关系的方法。一般用于电极过程动力学的研究。

计时电势（位）法 chronopotentiometry 在电分析化学中，通过电流阶跃，记录电极电位-时间关系的方法。可用作分析测定、电极反应及电极表面现象的研究以及化学动力学的研究。

计时分析法 chronometric method 建立在测量电化学讯号（如电流、电量或电位）与时间关系基础上的方法。可分为计时电流法、计时电位法和计时库仑法等。

计时库仑法 chronocoulometry 在电分析化学中，通过电位阶跃，记录电量-时间关系的方法。一般用于电极过程动力学的研究，对研究电活性物质的吸附作用特别有用。

计数率 count rate 检测器中每秒获得的计数，常用英文 count per second 的缩写 CPS 来表示。是强度的一种计量单位。

计算分光光度法 computational spectrophotometry 是将计算数学引入分光光度法，用数学方法处理分光光度法测量数据，并完成测定的一种方法。传统的分光光度法适用对象较广，灵敏度较高、精密度也较好，仪器设备相对简单、价廉。但此法突出的缺点是只能测定单一组分，当共存组分相互干扰时，需经分离或掩蔽等繁杂步骤。倘若用适当的计算数学方法（即化学计量学方法）处理相互干扰组分体系的吸光度数据，便可以“数学分离”代替或部分代替化学分离，达到多个组分同时测定的目的。常用的计算分光光度法有多元线性回归法（MLR）、主成分回归法（PCR）、偏最小二乘法（PLS）、卡尔曼滤波（KF）等。目前在实际应用中，这种采用计算数学方法处理分析数据的方法已被推广到电分析化学、色谱分析等其他分析领域。

计算误差 computational error 在计算过程中，由于将复杂的表达式以近似式代替，或由于数字修约而产生的误差。

记忆峰 memory peak 又称残留峰。它是指在前次色谱测定中的样品组分在下一次的色谱测定中，又以同样的保留时间重新出现一个色谱峰（一般比较小）。记忆峰虽小，但严重时会影响分析结果，应设法避免。

记忆效应 memory effect 在不同的学科领域有不同的含义。在原子吸收光谱分析中，是指前次测定时被测元素未能完全清除而造成对随后测定的影响。在火焰原子吸收光谱分析时，先吸喷了高浓度的溶液，由于在雾化室壁和燃烧器内有其残留物，造成对后续试样测定的影响，使测定结果偏高。在石墨炉原子吸收光谱分析时，由于某些元素形成难离解碳化物，或者难熔氧化物残留在石墨炉内，或者已蒸发出来的试样又在温度较低的石墨管两端冷凝，而在原子化后的除残阶段又未能将它们完全除去，使得在下次测定其他试样时又逐渐缓慢地蒸发出来。在石墨炉原子吸收分析中，它导致原子吸收信号曲线拖尾，延时返回基线。通过高温空烧、通气等操作，可以减小或消除记

忆效应。在气相色谱分析中，尤其是测定含极性组分混合物时，样品从汽化室向检测器移动的过程中，由于部分极性组分可能在某一部位，如汽化室内壁、进样器隔膜、裸露的载体表面或连接管的死区域等被可逆吸附或滞留，这些被吸附或滞留的组分在一定的色谱条件下又会显示出色谱峰。在液相色谱中，当改换一种洗脱溶剂时，遗留在色谱柱上的组分就会被洗脱下来并以色谱峰的形式出现。记忆效应对色谱的定性和定量分析均有干扰，因此应予避免或设法消除。

技术法规 technical regulation 由权力机构通过的有约束力的规定技术要求的法律性文件。它直接规定或引用或包括标准、技术规范或规程的内容而提供技术要求的法规。它有时还包括一些方法性条文，简述符合法规要求所采取的某些方法的技术指导。

技术规范 technical specification 规定产品、过程或服务应满足的技术要求的文件。它可以是标准、标准的一部分或与标准无关的独立的文件。在技术规范中，规定了应满足的技术要求是否达到的检查和检验方法。

剂量-反应曲线 dose-response curve 表示一种化学物的剂量与群体中呈现某种效应并达到一定强度的个体在群体所占的比例之间的关系的曲线。例如半数致死量就是表示剂量与死亡反映的关系。一般以剂量为横坐标，以反应为纵坐标绘制剂量-反应曲线。毒理学剂量-反应曲线主要有三种类型，即直线型、抛物线型及S状曲线型。

加合离子 adduct ion 中性分子M与离子B^+或B^-加合后形成的$[M+B]^+$或$[M+B]^-$离子。例如，$[M+Na]^+$、$[M+NH_4]^+$、$[M+Cl]^-$等。通过加合离子可以获得分子量信息。

加和法则 sum rule 在X射线荧光光谱学中，用于估算同一谱系的一组多重线相对强度的经验法则。按照这条经验规律，在一组多重线的始态或终态能级的劈裂可以忽略或谱线产生于同一单个不可分的能级（如K能级）时，波长相近的双线如$K\alpha_1$和$K\alpha_2$辐射，其相对强度可由始态或对应的终态的相对加权来估算。能级的统计加权$g_i=2J+1$，式中，J为内量子数。对于LⅡ和LⅢ能级，J分别为3/2和1/2，故其统计权重g_i分别为4和2，即$K\alpha_1$辐射的强度应为$K\alpha_2$辐射的两倍，这与实验结果十分接近。用这条规则估算L系谱线的相对强度比K系更复杂些，但谱线相对强度的大小，仍主要由J值决定。

加权回归 weighted regression 利用加权最小二乘法拟合回归方程和回归线。如果建立回归方程和回归线的各试验点的精度不同，对各试验点赋予与它们精度相应的权值，以使得各试验点的精度保持一致。

加权平均值 weighted mean 对各测量值加权后计算出的算术平均值，是全部加权值之和除以总权值。

$$\bar{x}_w = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i}$$

式中，w_i 是权值，$w_i = n_i/S_i^2$；S_i^2 是测定 x_i 的方差。加权平均值是一组不等精度测量值中出现概率最大的值，是总体平均值 μ 的最佳估计值。

加权平均值的标准偏差 standard deviation of weighted mean 表征加权平均值离散性的特征参数，记为 σ_w^2。在有限次测量中，可用样本加权平均值的方差 S_w^2 估计 σ_w^2。

$$S_w = \sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^{m} \frac{n_i}{S_i^2}}}$$

式中，S_i^2 和 n 分别是测定 m 个平均值中第 i 个平均值的方差与测量次数。

加权最小二乘法 weighted least square method 在一组不等精度的测量值中，最佳值能使各测量值的加权平方和最小。

$$Q_w = \sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - Y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} w_i [y_i - (a + bx_i)]^2$$

式中，w_i 是权值。通过求极小，令 $\frac{\partial Q_w}{\partial a} = 0$ 与 $\frac{\partial Q_w}{\partial b} = 0$，求得 a 与 b，建立加权回归方程。

加热雾化室 heating spray chamber 一种加热雾化装置。将进入火焰的气溶胶在雾化室进行预干燥，从而可以加速气溶胶在火焰中的原子化，只需经历较短的路程即被解离和原子化。同时使进入火焰的干气溶胶量增加，提高了样品的利用效率。加热的方式有电热丝加热，红外线照射，高频加热等。

加速腐蚀试验 accelerated corrosion test 在比使用条件更苛刻的条件下进行的腐蚀试验，目的是在比实际使用条件更短的时间内预测长期腐蚀效应。为了能与实际使用条件下的结果比较，一般加速试验不可改变实际使用条件的腐蚀机理。

加速器质谱仪 accelerator mass spectrometer; AMS 质谱仪的一种，用来测量长寿命放射性和部分稳定性核素的同位素丰度，从而推测被测样品的年龄或进行同位素示踪。主要用于放射性废物、考古、环境、医学领域的分析。该方法的主要优点是灵敏度极高，测定 $^{14}C/^{12}C$ 同位素丰度比可达到 10^{-15}；样品用量少，μg ~ mg 级样品即可。

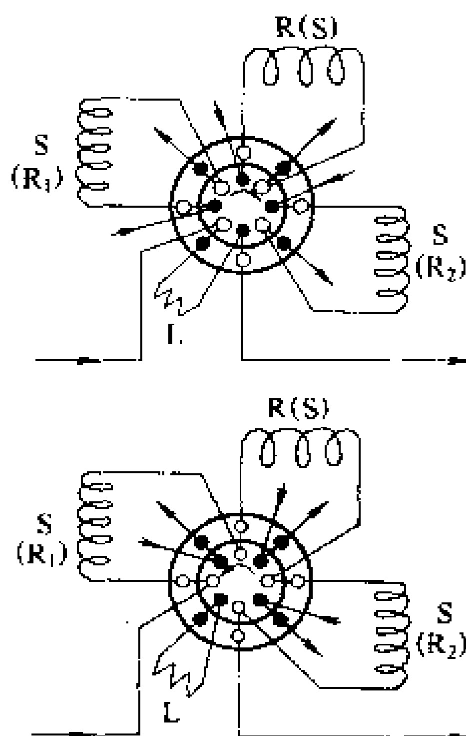
加速溶剂萃取法 accelerated solvent extraction method 简称 ASE 法。是一种在提高温度和压力的条件下，用有机溶剂萃取的自动化方法，萃取温度在 150 ~ 200℃，压力在 3.3 ~ 19.8MPa。温度和压力的提高可使接触的表面平衡遭到破坏，升高温度可提高溶剂溶解待测物的能力，加快扩散速度。提高压力是为了在高于常压沸点温度的情况下保持提取溶剂为液态。ASE 主要应用于环境分析及农药残留物测定。

加盐萃取精馏法 extraction rectification in presence of salt 同时加入盐

和溶剂进行精馏分离，以提高被分离体系分离效率的分离方法。萃取精馏法通过加入溶剂而增加被分离物质的相对挥发度，但溶剂用量大，操作成本高。熔盐精馏法改善分离效果显著，但固体物料输送不便，盐的回收较困难。加盐萃取精馏法则集中了萃取精馏和熔盐精馏的优点。其特点是用含有溶解盐的溶剂作为分离剂，克服了溶剂用量大的缺点，同时又能保持液体分离剂易循环和回收，便于在工业生产上实现的优点。例如用精馏法分离乙醇与水的混合物无法制取无水乙醇。加入体积比为 1∶1 的乙二醇和醋酸钾至分离体系中。乙醇对水相对挥发度比不加醋酸钾时提高了 30% 以上，可获得 99.5% 的无水乙醇，而不加醋酸钾时需多加入 4～5 倍体积的乙二醇。

夹层槽 sandwich chamber 又称 S 槽。是薄层色谱法中采用的一种特殊的展开槽。它的特点是：薄板本身作为展开槽的一壁，另一壁为在薄板上方覆盖的一块盖板，二者之间上、左、右三面均用垫片隔开，垫片厚度约为 2～3mm，用夹子夹紧，使之密闭不漏气，将下端开口部分浸入溶剂内即可进行展开。这样组成的展开槽因槽内空间很小，极易为展开溶剂蒸气所饱和，用夹层槽展开比用大槽展开的效果好。

夹层带技术 sandwich zones technique 是 FIA 实验技术之一，通过一支 16 孔阀或由两支 6 孔阀套接，实现由一个载流载带 3 个定量采液环中的试液顺序进入分析系统的技术，见下图。3 个定量环的采液方式是：(1) 试剂/试样/试剂；(2) 试样/试剂/试样；(3) 试样 1/试样 2/试样 3 等。它较合并带技术更方便、可靠，且有更好的灵敏度。充分体现阀的多功能性。



R，R_1，R_2—试剂；S—试样

夹杂分析 inclusion assay 对钢中夹杂物粒度评级的形态及类型分析。钢中的夹杂物状况对钢材的质量有着重要的影响。进行夹杂分析时，为测定组成及其数量，通常用电解法将夹杂物从钢中抽取出，再用氧化性酸溶液溶解除去渗碳体等碳化物，分离出稳定氧化物，用精密天平称量测定其总量；由元素分析（Si、Al、Ca、Mg、Fe 等）换算出各氧化物含量。硫化物和氮化物不易定量地分离出，常在电解抽取后直接测定硫和氮。X

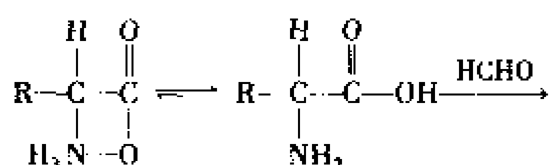
射线衍射用来确认夹杂物种类。新开发的 CMA 法（计算机辅助的电子探针分析）可获得夹杂物形态、黏度、分布、体积百分率等多种数据且不必抽取分离。

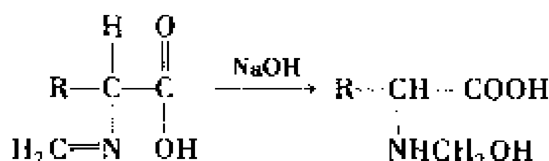
甲酚紫 cresol purple 是一种酸碱指示剂，其变色范围（pH）在 7.6～9.2 之间。它在酸性溶液中显黄色，碱性溶液中呈红紫色。

甲基丙二酸排泄试验 methylamalonic acid excretion test 甲基丙二酸-辅酶 A 转变为琥珀酸-辅酶 A 的异构化过程中需要维生素 B_{12} 辅酶。当维生素 B_{12} 缺乏时，由尿排泄甲基丙二酸的量增多，每日可达 300mg 以上，正常人每日排泄量不超过 9mg。

甲基红试验 methyl red test 简称 M. R 试验。主要用于产气肠杆菌和大肠埃希菌的鉴别，亦可用于肠杆菌科中一些菌属间的鉴别。原理是细菌在糖代谢过程中，分解葡萄糖产生丙酮酸，丙酮酸进一步被分解为甲酸、乙酸、乳酸和琥珀酸等，使葡萄糖-蛋白胨培养基的 pH 值由 7.5 降到 4.4 或更低，从而使甲基红指示剂呈现红色。

甲醛滴定法 formol titration method 一种测定氨基酸总量的方法。在一定 pH 值范围内，氨基酸中酸性—COOH 基和碱性—NH_2 基相互作用，产生中性的内盐。但在甲醛溶液存在时，—NH_2 基先与甲醛结合，使其不能形成内盐。用标准碱溶液滴定—COOH，从而可以测定氨基酸总量。其反应式如下





或



或



或



由下式计算氨基酸态氮含量（质量百分数）

$$\text{氨基酸态氮含量} = \frac{(V_1 - V_2) \times c \times 0.14}{m} \times 100\%$$

式中，c 是氢氧化钠标准溶液的浓度，$mol \cdot L^{-1}$；V_1 是用中性红作指示剂滴定时消耗氢氧化钠标准溶液体积，ml；V_2 是用百里酚酞作指示剂滴定时消耗氢氧化钠标准溶液体积，ml；m 是所取样品溶液中样品的质量，g；0.14 是氮的毫摩尔质量，$g \cdot mmol^{-1}$。

甲胎蛋白 α-fetoprotein; AFP; α-FP 胚胎期由卵黄囊和肝细胞产生，是胎儿特有的一种糖蛋白，分子量 6.5～7.0 万。正常人含量极微（$<20\mu g \cdot L^{-1}$），当肝细胞恶变时，含量大大升高。AFP 的检测对原发性肝细胞癌的早期诊断很有价值，但并无特异性，生殖腺胚胎性肿瘤、孕妇

及急性肝炎等人也可检出AFP。产前检测羊水AFP有助于发现异常妊娠，如胎儿脊柱裂、无脑儿等。

甲状腺释放激素刺激实验 thyroid-releasing hormonestimulation test 静脉注射促甲状腺激素释放激素400μg后90min测定血清中促甲状腺激素水平。垂体功能衰竭所致的甲状腺功能减退，血清中促甲状腺素水平很低，对刺激试验没有反应。原发性甲状腺功能减低时，对刺激试验反应增强。

假峰 ghost peak 又称鬼峰、外来峰。它是色谱分析中本不应该出现的组分的色谱峰。出现假峰的原因各式各样，如在程序升温气相色谱法中，进样系统的隔膜材料性能不好，色谱柱的固定液流失等都会出现一系列的假峰。当分析某些热不稳定的化合物如萜烯类等，以及当色谱系统存在有催化效应时，也会在色谱图中出现热分解或催化分解产物的色谱峰，这些峰的高度和区域宽度往往是会变化的，不能代表组分的真实分布，故称为假峰。

假设检验 hypothesis test 根据样本数据来检验关于总体参数的假设，以判断总体分布是否具有指定的特征。如果不知道随机变量分布的函数形式，只是假设其具有某种分布形式，假设是否正确，需根据样本数据通过检验特征分布参数来证实。假设检验是先对被检验的特性参数做出统计假设 H_0，称为原假设，并假定 H_0 成立，然后检验 H_0 同样本数据是否存在显著性矛盾。如果不存在显著性矛盾，就接受 H_0；如果存在显著的矛盾，就拒绝 H_0，而代之以接受另一个称为备择假设的统计假设 H_1。

价带结构 valence band structure 在固体样品中，由于原子和分子不再是分离态的物质，而是相互作用形成聚集体，所以该类物质的价电子结构不能再用简单的自由原子或分子的分裂能级来描述。由于能级的相互作用和组合，形成的不再是分裂的能级而是形成了连续的带状分布。这种价电子的电子密度分布结构称为价带结构，也可以称为能带结构。

价带谱 valence band spectroscopy 价带谱反应了固体价带结构的信息，由于X射线光电子能谱（XPS）价带谱与固体的能带结构有关，因此可以提供固体材料的电子结构信息。但由于XPS价带谱不能直接反映能带结构，还必须经过复杂的理论处理和计算。因此，在XPS价带谱的研究中，一般采用XPS价带谱结构的比较进行研究，而理论分析相应较少。

价态分析 valence analysis 对某元素在环境中存在的各种氧化态分别进行测定的方法，是在分子水平上进行污染物形态分析的重要内容。确定氧化态无固定程序，系根据其反应性能、类型及生成物化学组成的不同，用多种方法结合进行，必须从样品处理，包括样品保存这一步就开始注意。

架桥化固定法 bridging immobilization 用多功能的试剂，如戊二醛与酶蛋白分子，相互结合，起着桥梁

的作用，从而使酶固定于电极表面的酶固定化方法。

间断洗脱色谱法 interrupted-elution chromatography 用不同组成或不同浓度的淋洗液，不连续地分别洗脱保留在色谱柱上的不同性质的物质组分。在制备色谱中常采用间断洗脱法。

间隔分段器 segmentor 又称相分隔器。使有机相和水相在萃取管中分隔成均匀的间隔段。采用铂毛细管导入有机相，改变铂管口与插入的萃取盘管口之间的距离，可有效地调节两相分隔段的大小，即有机相和水相的比例，以达到最好的萃取条件。

间接测量法 indirect method of measurement 通过测量与被测量有函数关系的其他量，才能得到被测量的量值的测量方法。例如，通过测量导体电阻、长度和截面积确定电阻率，在光度分析中，通过测量入射光与透射光强确定吸光度值。

间接分光光度法 indirect spectrophotometry 利用各种间接方法对被测物质进行分光光度测定的方法。例如，利用氟离子与锆的配位作用可使锆与茜素磺酸钠生成的红色配合物褪色的作用，间接测定氟离子。

间接光度（检测）离子色谱法 indirect photometric ion chromatography 将离子色谱分离与间接光度检测结合起来的色谱分析方法。一般情况下间接光度检测指的是间接紫外吸收光谱检测。大部分无机离子和部分有机离子在紫外区无吸收，可以使用有较强紫外吸收的淋洗剂或离子对试剂，检测信号是样品离子流出时流动相紫外吸收的减小值。

间接光度（检测）色谱法 indirect photometric chromatography 采用间接光度检测技术检测无紫外吸收样品的液相色谱分析方法。一般情况下间接光度检测指的是间接紫外吸收检测。它是在流动相中加入有较强紫外吸收的试剂，这种紫外吸收试剂在离子色谱中称紫外洗脱试剂，在离子对色谱中称离子对探针，在普通液相色谱中称紫外显色试剂。间接光度检测在离子色谱中应用得最多。

间接检测 indirect detection 在检测中，检测信号不是来自样品本身，而是来自背景电解质离子。通过相对于稳态时背景信号的变化进行样品的溶质测定。

间接凝集反应 indirect hemagglutination 这是用已知抗原致敏红细胞检测抗体的一种血清学方法。许多不能引起直接血凝反应的病原微生物的抗原物质，可将其抗原成分吸附（或结合）在O型人红细胞或绵羊红细胞上。这种抗原致敏红细胞若与相应抗体相遇，可发生血凝，称为间接血凝反应。此反应由于吸附于红细胞表面上的抗原与其相应抗体发生结合时，红细胞被动地凝集在一起，故又称被动血凝反应。反之，如将已知抗体吸附（或结合）在红细胞上，通过血凝反映以检测相应的抗原，则称为反向间接凝集反应。这是利用特异性抗体致敏红细胞，对相应抗原具有

敏感性，通过抗原抗体的特异性结合而出现血凝现象。红细胞起到载体的作用，使微量可溶性抗原抗体的结合成为肉眼可见的需凝现象。在间接血凝反应中，可溶性抗原先与抗体反应，以后再测此抗体能否与吸附抗原的红细胞发生凝集。如抗体已与可溶性抗原抗体结合，它就不再使吸附抗原的红细胞发生凝集，即为间接血凝抑制试验。此法可滴定可溶性抗原。间接例凝反应是一种敏感的测定抗体的方法，可检测病人血清中相应的抗体，或在自身免疫性疾病中，检测甲状腺球蛋白抗体、类风湿因子、抗DNA 抗体等。反向间接血凝试验主要用于检测微量抗原（毒素、细菌等），作为传染病早期快速诊断的方法，还可用于研究人和动物组织抗原，激素抗原的检测。

间接荧光法 indirect fluorescence method 对于不发荧光或荧光量子产率很低的物质可用间接荧光法测定。间接荧光法有多种。第一种称为荧光衍生法，它是通过化学反应将非荧光物质转变为适合于测定的荧光物质的方法，许多无机金属离子通过与有机螯合剂反应生成荧光螯合物进行测定；不发荧光的有机物可以通过光化学反应、降解反应、氧化还原反应、偶联反应、缩合反应或酶催化反应等转化为荧光衍生物。第二种间接荧光法是荧光猝灭法，待测物具有使某种荧光化合物荧光猝灭能力时，通过测量荧光强度的下降可以间接地测定待测物。此外，利用能量转移的敏化发光的方法也可以进行间接荧光测定。作为敏化剂的一种物质吸光后将能量传递给发光物质，测定发光物质荧光强度的方法称为敏化荧光法。

间接荧光检测 indirect fluorescence detection 将不具有荧光性质的样品通过化学衍生转变成具有荧光发射或荧光猝灭性质的物质后进行检测的方法。

间接荧光抗体技术 indirect fluorescent antibody technique 用于检测抗体或抗原的技术。荧光素标记的抗体不直接与待检的分子结合，但可与中介的抗体或抗原结合，使敏感性增加。例如夹心技术、双层荧光抗体技术、荧光标记的抗补体血清技术等。

间接原子吸收光谱法 indirect atomic absorption spectrometry 利用被测元素或组分与可用原子吸收光谱法方便测定的元素产生化学反应，然后用原子吸收光谱法测定反应产物中或未能反应的过量的可方便测定的元素，由此计算被测元素或组分的含量的方法。常利用沉淀反应、络合反应、氧化还原反应、杂多酸的“化学放大”效应以及干扰效应进行间接原子吸收光谱分析。它对于不能直接用原子吸收光谱法测定的阴离子和有机化合物、用直接原子吸收光谱法测定灵敏度不高的难熔元素和稀土元素、共振吸收线位于远紫外区的元素如 F、C、Br、I、S、P、As、Se 等的测定是很有用的。间接原子吸收光谱法可以提高某些元素的测定灵敏度、扩大原子吸收光谱法的应用范围。

间接紫外检测 indirect ultraviolet detection 在液相色谱中，用含有强紫外吸收物质的溶液作流动相，实现无紫外吸收样品检测的方法。没有被测物洗脱时，流动相的背景紫外吸收很高，当无紫外吸收的样品洗脱下来时，将使流动相背景吸收降低，在色谱图上出现负方向的色谱峰。该方法在离子色谱中常用来检测无紫外吸收的无机离子。

剪式振动 scissoring vibration 见**弯曲振动**条。

剪纸称重法 cut-paper weighing method 色谱定量分析中测量峰面积的一种方法。将色谱峰从记录的色谱图纸上剪下来（要求记录仪用纸均匀），直接称取纸的质量，作为相应峰的峰面积的量度。由于操作繁琐，这种方法已很少使用，但在没有积分仪或工作站的情况下，人工测量峰面积时，尤其对于很不规则的色谱峰的峰面积，仍采用这种方法。

检测灵敏度 detection sensitivity 即检测器的最低探测浓度，取决于最小探测峰值。是指能够与背景分辨的峰的最低计数，称为最小探测峰值，或探测极限。检测灵敏度与很多因素有关，有方法本身的限制，也有仪器参数的限制，对每台谱仪其检测灵敏度会有差异，这主要与仪器设备的硬件有关。

检测器检测限 detector detectability 以 D 表示，是指当检测器能产生的信号相当等于2倍噪声（现有时用3倍）时，检测器内被测物质在流动相中的浓度或质量。检测器检测限 $D=\frac{2N}{S}$，式中，N 为噪声（即基线的波动，以 mV 或 A 表示）；S 为检测器灵敏度（以 $mV \cdot ml \cdot mg^{-1}$ 或其他适当方式表示）。在通常的分析中，色谱峰的信号应大于2倍的检测器噪声。

检测器灵敏度 detector sensitivity 以 S 表示，是指在流动相中单位浓度或单位质量某物质通过检测器时所产生的响应信号，也即检测器响应信号随进样量的变化率。检测器灵敏度的表达式为 $S=\frac{\Delta R}{\Delta Q}$，式中，$\Delta Q$ 为进样量的变化；ΔR 为检测器响应信号的变化。对浓度型检测器，灵敏度的单位为 $mV \cdot ml \cdot mg^{-1}$ 或 $mV \cdot ml \cdot ml^{-1}$；对质量型检测器，灵敏度的单位为 $mV \cdot s \cdot g^{-1}$ 或 $A \cdot s \cdot g^{-1}$。

检测器线性范围 detector linear range 是指其信号与被测物质浓度或质量呈线性关系的范围，可以用呈线性响应的样品最大和最小进样量的比值或线性范围内样品浓度上、下限的比值来表示。检测器线性范围反映了检测器对样品不同浓度的适应性，比值越宽，说明在定量分析中可能测定的浓度范围就越大。

检测依附核的极化增强实验 polarization enhancement during attached nucleus testing; PENDENT 一种利用极化转移技术区分（CH_n）（$n=1$，2，3）基团的方法。它是无畸变的极化转移增强方法（DEPT）的改进，

一次实验可获得区分（CH_n）基团的^{13}C共振信息。信号相位也不易扭曲，更优于不灵敏核的极化转移增强法（INEPT）。其脉冲序列如下

$$^{13}\text{C 观测核 } 90^\circ_x \text{ ——————— } 180^\circ_x \text{ ——— } 90^\circ_{-y} \text{ ——————— } 180^\circ_x \text{ —— （采集 FID）}_y$$

$$^{1}\text{H 辐照核 } 90^\circ_x \ -\tau_1\left(\frac{1}{4J_{CH}}\right)-180^\circ_x \ -\tau_1-90^\circ_{-y} \ -\tau_2\left(\frac{5}{8J_{CH}}\right)-180^\circ_x \ -\tau_2-\text{去耦}$$

检出水平 detection level 在对异常值进行统计检验时，指定为检出异常值的显著性水平 α。一般取 $\alpha=0.05$ 或 $\alpha=0.10$。指定为检出高度异常的异常值的显著性水平 $\alpha=0.01$，称为舍弃水平，又称剔除水平。

检出限 detection limit 能产生一个确证在试样中存在被测组分的分析信号所需要的该组分的最小含量或最小浓度。检出限的定量定义是：在测量误差遵从正态分布的条件下，能用该分析方法以适当置信度（通常取置信度 99.7%）检出被测组分的最小量或最小浓度。可由最小检测信号值与空白噪声导出，最小检出量和最小检出浓度分别以 q_L 和 c_L 表示。

$$q_L=\frac{\overline{A}_L-\overline{A}_b}{b}=\frac{3S_b}{b}$$

$$c_L=\frac{\overline{A}_L-\overline{A}_b}{b}=\frac{3S_b}{b}$$

式中，$\overline{A}_L$ 是分析样品在检出限水平时测得的分析信号的平均值；$\overline{A}_b$ 是对空白样品进行足够多次（例如 20 次）测量所测得的空白信号平均值；S_b 是测量的标准偏差；b 是低浓度区校正曲线的斜率，它表示被测组分含量或浓度改变一个单位时分析信号的变化量，即灵敏度。检出限是表征分析方法检测能力的一个参数，评价分析方法的一个基本指标。

检出限的控制 control of detection limit 在分析测试中为使检出限控制在尽可能的最低水平所实施的有计划的活动。检出限取决于空白噪声，在痕量分析中，要尽量使测试条件最佳化，以降低空白噪声。当被测量水平低于 3 倍空白噪声，测定量值是可疑的；等于 3 倍空白噪声，相当于最低检出限，测定量值是可靠的；等于和大于 10 倍空白噪声，能有效地进行定量测定。参见**检出限**条。

检出^{1}H 的异核单量子相干实验 ^{1}H detected heteronuclear single quantum coherence; HSQC 脉冲序列如下

$$^{1}\text{H 观测核 } \ 90^\circ-\tau-180^\circ-\tau-90^\circ-\frac{t_1}{2}-180^\circ-\frac{t_1}{2}-90^\circ-\tau-180^\circ-\tau-\text{采集 FID }(t_2)$$

$$^{13}\text{C 核 } \text{ ——— } 180^\circ \text{ —— } 90^\circ \text{ ————————— } 90^\circ \text{ —— } 180^\circ \text{ ———}$$

其中 $\tau=1/(4\,^1J_{CH})$。序列中 t_1 演化期起着对^{1}H 信号受^{13}C 化学位移调制，赋予 $\delta(^{13}C)$ 的标识。其前后分别是不灵敏核的极化转移增强法（INEPT）和反 INEPT，实现^{13}C 的极化增强的单量子相干，并返回给^{1}H 后采集 FID。HSQC 谱形式与 HMQC 谱相同，两者灵敏度相当。但相关信

息（F_1 域）不被同核耦合所加宽，因此在密集的^{13}C NMR 谱区，具有一定优越性。HSQC 在蛋白质结构分析中，是获取 C—H、N—H异核相关及分子片的连接关系的最基本的方法。

检出^{1}H 的异核多量子相干实验 ^{1}H detected heteronuclear multiple quantum coherence; HMQC 借助于异核之间的弱耦合作用，利用 HMQC 脉冲序列产生异核多量子相干，由^{1}H 间接检测低自然丰度和低磁旋比的核（如^{13}C,^{15}N 等）的方法。HMQC 基本脉冲序列

$$^1\text{H 观测核}\quad 90^\circ_x - \tau\left(\frac{1}{2^1J_{CH}}\right) - \frac{t_1}{2} - 180^\circ_{\phi_2} - \frac{t_1}{2} - \tau\left(\frac{1}{2^1J_{CH}}\right) - \text{采集 FID}_{\phi_R}(t_2)$$

$$^{13}\text{C 核}\quad \text{———}90^\circ_{\phi_1}\text{———}90^\circ_x\text{———去耦}$$

90°_x-$1/(2^1J_{CH})$使^{1}H 核产生反相横向磁化，$90^\circ_{\phi 1}$(^{13}C)脉冲使之转变成多量子相干，演化期 t_1 赋予^{13}C 化学位移的标记，并交换零量子相干与双量子相干项，最后 90°(^{13}C)使双量子相干再变回到反相磁化。利用相循环检出，有效地抑制了零量子相干。在 HMQC 谱中，F_1 域是 X 核（如^{13}C，^{15}N)的化学位移，F_2 域为^{1}H 的化学位移，由于还保留$^1J_{CH}$耦合，每个^{1}H 谱线对应有一对交叉峰，其中点是该^{1}H 的化学位移。

检定 verification 通过检查和提供证据来证实所规定的要求已经得到满足。它提供了一种检查测量仪器的示值和相对应的被测量的已知值之间的偏差，并使其始终小于有关测量设备的管理标准、规程和规范中所规定的最大允许误差的方法，并根据检定结果作出该测量仪器恢复使用、调整、修理、降级或报废的决定。

检定管法 detection tube method 一种定性(或半定量)检出微量气体的分析方法。在细长的玻璃管中填充浸透了显色剂的吸附剂，两端拉成细管以易于通进气体试样。气体由管的一端导入时由于吸附剂颜色变化可灵敏地检出某种气体物质的存在。

检验 test 按照规定的程序，为了确定给定的产品、材料、设备、生物体、物理现象、工艺过程或服务的一种或多种特性或性能的技术操作。检验时所使用的规定技术程序，称为检验方法。

检验统计量 test statistics 简称统计量。进行统计检验的参量，是一个遵从一定统计分布的随机变量，不包含总体分布中任何未知参数的样本函数，且概率密度函数已知。

$$\chi^2 = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2,$$

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{S_{\bar{x}}}, F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$$

等都是统计量，可分别用来检验总体方差的变化、总体均值与两方差的一致性。利用统计量可以对被估参数的数值在统计上进行估计。

简单断裂 simple cleavage 在质谱分析中，只是一个化学键断裂而不

伴随重排者，称为简单断裂。

简单格子 primitive lattice 按照法国学者 A. Bravais 的准则选出的平行六面体单位格子(晶胞)为素晶胞的晶体点阵。素晶胞的特点是：在每个单位格子中除了作为最基本骨架的 8 个顶角上的点阵点之外，不含有任何附加的点阵点。因每一个顶角上的点阵点在晶体点阵中为相邻的 8 个等同的平行六面体所共享，所以，每个素晶胞在晶体点阵中占有的点阵点的数目为 1。

简单随机抽样 simple random sampling 在样本中任一样品单位被抽中的概率相同的抽样。所抽得的样本，称为随机样本。它适用于均匀的样品总体。

简正振动 normal vibration 又称简正方式。由 n 个原子组成的多原子分子的振动，可以看做是由许多弹簧连接起来的小球构成的体系的振动，共有 $3n-6$ 种振动方式。这$3n-6$种基本振动称为分子的简正振动。对线型分子应有 $3n-5$ 种振动方式。分子简正振动的特点是，分子质心在振动过程中保持不变，分子整体不转动，每个原子都在其平衡位置附近做简谐振动，其振动频率和位相都相同，即每个原子同时通过其平衡位置，并在同一时间达到最大位移值。分子中任何一个复杂振动都可看成是这些简正振动的叠加(即线性组合)。简正振动基本上可分为伸缩振动 ν 与弯曲振动 δ 两大类。伸缩振动是原子沿着键轴方向伸缩使键长发生变化的振动，分为对称伸缩振动 ν_s 和反对称伸缩振动 ν_{as}，前者在振动时各键同时伸长或缩短，后者在振动时某些键伸长而另外一些键缩短。弯曲振动是键角发生变化的振动，又称变形振动。它分为面内弯曲振动 $\delta^{面内}$(有人记以 β)和面外弯曲振动 $\delta^{面外}$(有人记以 γ)。前者是振动方向位于分子的平面内，包括剪式振动(基团中两原子在同一平面内相向与背向的弯曲，记以 δ)和平面摇摆振动(基团整体在平面内左右摇摆，记以 β，有人记以 r)；后者是基团的有关原子在垂直于分子平面方向上振动，包括非平面摇摆振动(基团整体地在分子所在平面的上下摇摆，基团键角不发生变化，称为仰动，记以 π 或 ω)和扭曲振动(振动时基团整体围绕着连接这个基团和其余分子片的某些键离开分子平面来回扭动。若围绕着单键扭动，如—CH_3 绕 C—CH_3 键的扭动，则称扭转，记以 τ；若围绕着两个单键扭动，如—CH_2—绕两个 C—CH_2 键的扭动，则称扭绞，记以 t)。

减色作用 hypochromism 分光光度法术语，指减少吸收强度的作用。

减尾剂 tailing reducer 在色谱分离中为调节载体表面的活性作用而在固定液中添加的一种化合物。它可以改善色谱峰的拖尾现象，故称为减尾剂。例如在分析碱性物质或酸性物质时，常在固定液中适量添加氢氧化钾或磷酸等。

减压液相色谱 vacuum liquid chromatography 利用抽真空减压的方式

加速淋洗剂流动的液相色谱法。常用于天然产物(如中药有效成分)的制备。在装有填料的玻璃柱后连接一个减压装置(真空泵)来提高淋洗液流速。

碱火焰电离检测器 alkali flame ionization detector;AFID 其结构是在一般的氢火焰离子化检测器(FID)的喷嘴上附加一个金属盐圈或盐片。当含有电负性原子的有机物样品在火焰里燃烧时,就会使该碱金属盐的蒸发和化学解离作用增加,从而使收集到的离子流或所得信号大为增加,提高了检测灵敏度。检测灵敏度随盐片成分不同而变化,常用的碱金属盐有 NaF、Na_2SO_4、CsBr、Rb_2SO_4 等,它是选择性的检测器,特别是磷、氮等的有机化合物检测灵敏度较高,最小检测量为 10^{-12} g 或更小,线性范围为 10^3。参见**氢火焰离子化检测器**条。

碱基 base 含氮化物,即嘌呤或嘧啶。组成核苷、核苷酸和核酸大分子的碱基有腺嘌呤、鸟嘌呤、胞嘧啶、胸腺嘧啶或尿嘧啶。DNA 分子不含尿嘧啶,RNA 分子中含有尿嘧啶。在 RNA 分子中还存在少量"稀有"碱基,它们多是 *N*-甲基或 *C*-甲基取代的腺嘌呤和鸟嘌呤。

碱基对 base pair 指 DNA 双螺旋中两条互补链间由氢键连接的嘌呤碱基和嘧啶碱基的相互配对。正常情况下,按照碱基配对原则,碱基对的组成为 A-T 和 C-G 两种配对形式,因此,只要知道一条多核苷酸链的碱基序列,就必然知道其互补链的碱基序列。在已知碱基序列的单股 RNA 分子中,根据碱基配对原则,可以推测其二级结构。

碱基序列 base sequence 指一个多核苷酸链中核苷酸组成的种类和特定排列顺序,即一级结构。通常根据其中所含的嘌呤碱基和嘧啶碱基的组分,用单个字母的缩写符号(A、G、C、T、U)表示,并需标明多核苷酸链的防线(3′端和 5′端)。测定 DNA 碱基序列的方法有多种,主要有化学断裂测序法、双脱氧末端终止法(酶学法)和物理学方法。现已可根据上述原理设计自动测序仪(含机器人测序)。

碱解扩散法 alkali hydrolysis diffusion method 也称扩散吸收法。一种测定土壤水解性氮的方法。用氢氧化钠水解土壤样品,在加热条件下,使有效态氮碱解转化为氨气,并不断地扩散逸出,由硼酸吸收,再用标准酸滴定,计算出水解性氮的含量。此法适用于各种类型土壤样品的测定,特别是对于还原性强的水稻土和沼泽土,可省去消除还原性物质的手续,测定范围 50 - 300μg 铵态氮。

碱洗法 alkali wash 对载体进行钝化处理的一种方法,目的是除去载体表面的 Al_2O_3 等酸性作用点。碱洗载体常用于分析胺类等碱性化合物。具体做法是用 5% 的氢氧化钾-甲醇溶液浸泡或回流载体,再用水冲洗至中性,放入烘箱中烘干后即可使用。

碱性磷酸酶 alkaline phosphatase 是指在碱性环境中具有活性的磷酸单

酯酶。在分子克隆中有广泛用途，一方面它可除去DNA线性分子末端的5′-磷酸基，以防止片段间彼此连接；另一方面克隆载体用限制性内切酶切割后，为防止自身连接，亦需用此酶处理脱去5′-磷酸基；再一方面DNA和RNA片段进行5′末端标记前先需经该酶脱磷，再由多核苷酸激酶将[γ-^{32}P]-ATP转移至5′末端。

溅射过程 sputtering process 离子束与表面原子发生相互碰撞的过程。分两步发生：离子与原子碰撞，将少部分能量（≈5%）传递给原子，先将原子撞击到更为暴露的位置上（即相邻原子数较少，能量较高的位置），而后在另一次碰撞过程中再将其溅射出去。碰撞过程会提高表面原子的迁移率。离子束其余的95%能量，部分以背散射离子的动能形式带走，而大部分以热能的形式释放。溅射引起一系列的过程发生，如：弹性和非弹性碰撞、联级碰撞中因原子混合引起的组成变化，离子束刻蚀引起的表面形貌的变化，溅射引起的表面反应、吸附、解吸、缺陷以及离子注入等。

溅射离子泵 sputtering ion pump 真空系统中的一种真空泵，可获得10^{-7}～10^{-8}Pa的极高真空度。主要是利用高压和磁场使残余气体分子大幅度电离，然后加速打入金属钛板中，从而使残余气体清除的方法。该泵具有无油、无振动以及无噪音的特点，对残余气体的抽速很快，可以直接安装在超高真空系统中。不足之处是该真空泵必须在真空度优于10^{-2}Pa的条件下才能启动，此外对氢和水气的抽速很慢。

溅射速率 sputtering rate 在进行离子溅射过程中，样品材料在单位时间内的剥离量，是衡量溅射过程快慢的参数。在离子枪溅射过程中，溅射速率与离子束的种类、离子束的能量、离子束入射角度、离子束的束流以及溅射面积有关。在溅射过程中有一个最佳的溅射能量，一般3～10keV的能量具有较高的溅射速率。随着离子束束流密度的增加，其溅射速率也相应增加。在常用的He、Ne和Ar三种溅射气体中，Ar气具有最高的溅射速率。

溅射阈能 threshold energy of sputtering 开始出现溅射时初级离子的能量。是描述溅射现象的主要参量。它对低能区的溅射产率有决定性的影响。只有离子束的能量超过溅射阈能，离子束才具有溅射作用。对不同的材料，其溅射阈能会有所不同。在一般的离子束溅射过程中，能量应保持在500eV以上。考虑到高能离子束对样品的损伤效应，一般采用能量为3～5keV的离子束进行溅射。

溅射中性粒子质谱 sputtered neutrals mass spectrometry；SNMS 一种与次级离子质谱相似，但可定量地用于表面成分分析和深度剖析的分析技术。其原理是利用离子束与样品的相互作用轰击出次级离子和中性粒子，然后通过带电粒子偏转的方式使离子被偏转掉，再使中性粒子进行电离，最后用质谱进行检测。由于中性粒子的

产率与溅射效应无关，每一种元素均具有相同的溅射产率。利用这部分产率与样品组分的简单的关系可以定量分析，具有比次级离子质谱高得多的定量分析准确度又具有相当的灵敏度。它具有分析元素多，检测灵敏度较高（但低于次级离子质谱），又能准确定量等优点，是现在发展比较快的一种分析方法。

键合固定相 bonded stationary phase 又称化学键合固定相。是指通过化学反应将固定相（功能分子）键合到基质表面后得到的色谱固定相。键合固定相耐高温和有机溶剂，是当今液相色谱中使用最广泛的色谱固定相。

键合型离子交换剂 bonded ion exchanger 通过化学反应使含离子交换功能基团的分子在基质表面形成化学键而制得的离子交换剂。

降解产物分析 degradation product analysis 指各种有机污染物特别是农药的母体在自然环境中由于水解、光化学作用或生物代谢作用导致化学键断裂生成的较小分子的衍生物即降解产物的分析，多用高效液相色谱法（HPLC）进行。这类降解产物大多可为细菌利用和分解，因而也可用生物需氧量（BOD）表示其浓度。

交叉场流分级 cross-field flow fraction 是分离方法的一种。用于分离从 0.001μm 到 1μm 的粒子，如病毒、血清和高分子微粒等的分离。场流分级本质上是一种单相色谱体系，用外场代替色谱中的固定相。交叉场流分级具有最大的普适性，其与场流分级的不同之处在于，交叉场流分级的外场是另一股与载流垂直的溶剂流。柱槽结构和热场流分级的结构相似，但上下板由半透膜组成。半透膜允许溶剂通过但不允许大分子溶质通过，因此它可以直接给出粒子按尺寸的分布。

交叉弛豫 cross-relaxation 二核（$I=\frac{1}{2}$）自旋体系 AX 中，存在着多种跃迁形式。当 A（或 X）核自旋状态保持不变而只改变 X（或 A）核自旋状态，即从 α 态变到 β 态或从 β 态变到 α 态，其核自旋磁量子数 $\Delta m = \pm 1$ 的跃迁为单量子跃迁。若跃迁同时涉及 A 核和 X 核和自旋态，则称为多量子跃迁，如体系在 $\alpha\alpha \leftrightarrow \beta\beta$ 态之间跃迁，因 $\Delta m = \pm 2$，被称为双量子跃迁。体系在 $\alpha\beta \leftrightarrow \beta\alpha$ 态之间的跃迁，因 $\Delta m = 0$，被称为零量子跃迁。NMR 中通常单量子跃迁是允许的，而多量子跃迁是禁阻的。核体系的激发和弛豫只表现为单量子跃迁。但是当磁性核空间距离相当靠近时，核的磁偶极矩之间的相互作用表现出可观的影响。多量子跃迁不再是禁阻的，体系也可通过此途径发生弛豫。发生这种弛豫时，体系中两核的自旋状态同时变化，因而称为交叉弛豫。

交叉反应抗体 cross-reaction antibody 可分两种：（1）能与异源抗原结合的一种抗体，对于交叉反应的发生，同源和异源抗原的决定簇必须具有高度的主体化学结构类似性。对一定的

抗原来说,交叉反应抗体往往比同源抗体具有较低的亲和力。(2)针对特定微生物的抗体可以与这种微生物相关的种相结合,有时也与那些完全不相关的种结合,这些微生物可能具有共同的抗原决定簇。

交叉峰 cross peaks 二维谱中对角线外(即 $\omega_1 \neq \omega_2$)的峰,三维谱中$\omega_1 \neq \omega_2 \neq \omega_3$ 处出现的峰为非对角线峰或交叉峰,也称相关峰(correlated peaks)。反映它所对应的坐标位置的相应两组峰之间的耦合关系或连接关系。交叉峰是多维谱中最有用的部分。

交叉极化 cross polarization;CP 利用稀核与丰核之间存在着强烈的偶极-偶极耦合等,导致极化传递来提高稀核灵敏度的一种方法。其基本作法是:对体系施加一个强静磁场,利用自旋锁定方法或绝热去磁方法使丰核(记以 I)系统的自旋温度冷却,接着使丰核与稀核之间进行"热接触"。当对稀核(记以 S)系统施加一个强度为$(\boldsymbol{B}_1)_S$ 的射频场并满足 $\gamma_S(\boldsymbol{B}_1)_S = \gamma_I(\boldsymbol{B}_1)_I$,丰核、稀核在各自旋转坐标系中的进动频率相同,Zeeman 能级间隔相等,此时 S 核自旋温度与晶格相同,且高于 I 核自旋温度。在固态化合物中,存在着强偶极-偶极相互作用,使 S 核自旋系统的能量按丰核的弛豫时间,很快地传递给 I 自旋系统。I 核是丰核,热容量远比稀核 S 大,当 S 与 I 系统达到热平衡时,S 系统几乎具有 I 系统的自旋温度,而大大降低,获得大的 S 系统的磁化,这就是交叉极化。经一次这样的(热接触)S 系统的磁化增强 γ_I/γ_S 倍。对^{1}H-^{13}C 的异核体系,^{13}C 信号可增强 4 倍。交叉极化法不仅使稀核灵敏度提高,而且磁化的恢复按丰核的弛豫时间进行,从而大大减少了重复实验的累加时间。

交换变窄 exchange narrowing 广义上说也是运动变窄的一种。自旋-自旋交换相互作用表示了电子交换的动态过程。电子交换相互作用常数 J 除以普朗克常数 h 即为频率单位,是表示交换频率的量。设未偶电子 1 处在磁场 $\boldsymbol{H}_a$ 处,另一个未偶电子 2 处在磁场 $\boldsymbol{H}_b$ 处。当电子 1 和 2 交换时,磁场只发生了 $\boldsymbol{H}_a - \boldsymbol{H}_b$ 变化。用频率单位表示即为 $(\boldsymbol{H}_a - \boldsymbol{H}_b)/\gamma$ 的频率变化。当 J/h 远小于 $(\boldsymbol{H}_a - \boldsymbol{H}_b)/\gamma$ 时,电子 1 和 2 所感受到的分别是接近于 $\boldsymbol{H}_a$ 和 $\boldsymbol{H}_b$ 的磁场;而当 J/h 远大于 $(\boldsymbol{H}_a - \boldsymbol{H}_b)/\gamma$ 时,就感受不到磁场的差别,而是感受到它们的平均值 $(\boldsymbol{H}_a + \boldsymbol{H}_b)/2$。也就是说,当交换速度变大时,其效果就是引起 ESR 谱线线宽变窄,即电子交换相互作用使线宽变窄,简称交换变窄。

交换电流密度 exchange current density 单位面积的交换电流值。

交换容量 exchange capacity 表征离子交换树脂性能的重要指标之一。单位质量干树脂或单位体积湿树脂所能交换的 1 价离子的物质的量,称为树脂的交换容量。交换容量随着实验或操作条件不同而表现不同的数值,可用总交换容量和工作交换容量来表征。总交换容量是由树脂中功能

基含量所决定的，对一种树脂，它是一个固定值。它的数值往往与树脂元素分析所得硫、氮、磷等的数量相关。工作交换容量指在一定的工作条件下，树脂所能发挥的交换容量，其值不同程度地小于总交换容量。它们的单位是 $mol \cdot g^{-1}$、$mmol \cdot g^{-1}$、$mol \cdot m^{-3}$或 $mmol \cdot ml^{-1}$等。

交换相互作用 exchange interaction 见**自旋-自旋交换相互作用**条。

交联度 crosslinking degree 聚苯乙烯树脂中二乙烯基苯的质量百分比。是聚苯乙烯树脂性能评价的一个重要参数，其大小决定树脂的孔结构。随着交联度的增加，树脂的孔隙度会降低、耐压强度会增加，溶胀效应会相应减小。但同时也会降低树脂颗粒的渗透性。

交联葡聚糖 cross-link dextran 是最早开发的有机凝胶。制备方法大体是：先用细菌发酵的方法以蔗糖为培养基制备成高分子量的葡聚糖，然后用稀盐酸降解成平均分子量为 $(4\times10^4)\sim(20\times10^4)$ 的葡聚糖，再用环氧氯丙烷交联形成体型结构，在油相内分散成球。主要应用于生物高分子如蛋白质、核酸的分离，生化体系的脱盐等。

交流电弧 alternating current arc 光谱分析中常用的激发光源之一。光谱分析中通常使用 220V 低压交流电弧。电压为几千伏的高压交流电弧，比低压交流电弧稳定，但由于不安全，很少使用。交流电弧特点是：放电具有脉冲性，再现性比直流电弧好，电极温度比直流电弧低，检测限比火花光源低。参见**交流电弧光源**条。

交流电弧光源 alternating current arc photosource 交流电弧光源是利用交流电在分析间隙发生电弧放电时产生的高温来激发试样光谱的光源。低电压交流电弧使用的电压通常为 220V，由专门的交流电弧发生器供给。发生器内安装了两部分电路，一是电弧电路，通过可调镇流电阻和电流表将交流电加到分析电极间隙上；另一是引燃电路，通过升压变压器、振荡回路和高频变压器将小功率火花叠加到分析电极间隙上，在交流电弧每半周期间放电而引燃起弧。与直流电弧光源相比，交流电弧光源具有放电稳定性好等优点。

交流伏安法 alternating current voltammetry 将一个小振幅（几个到几十个毫伏）低频正弦电压叠加在外加直流电压上面并作用于电解池，然后测量通过电解池的交流电流从而确定电解池中被测定物质的浓度或其相关的电化学特性的方法。该法可用于无机物的测定，有机物的分析和电极过程的研究（即电极反应机理的研究，电极反应速率常数的测定以及电极反应转移系数 α 的测定）。

交流阻抗法 alternating current impedance 将一个小振幅（几个到几十个毫伏）低频正弦电压叠加在外加直流电压上面并作用于电解池，然后测量电解池中极化电极的交流阻抗从而确定其与被测定物质的电化学特

性之间的关系。交流阻抗法已成为研究电极过程动力学以及电极界面现象的重要手段。

胶固补体吸收试验 conglutinating complement absorption test 免疫复合物形成时，从反应物中吸收补体的试验，可用于测定抗体。游离的未结合的补体存在与否，可经致敏红细胞和胶固素组成的指示系统检测出来。在阳性结果时，可见红细胞凝集现象。这与补提结合的原理相同，但用的是非溶血性补体，指示剂则是绵羊红细胞和牛血清的混合物。牛血清含有胶固素和对绵羊红细胞的天然抗体。

胶束 micelles 同时亲水和亲油的两性物质在水及非水溶剂中，超过一定的临界温度（*CMT*）和临界胶束浓度（*CMC*）时所形成的簇状物。它随着环境温度和物质浓度的变化会生成不同的形态，显示出极为丰富的结构特征。

胶束薄层色谱法 micellar thin layer chromatography 也称假相薄层色谱法、拟似薄层色谱法。是薄层色谱法中新发展起来的一个分支。该技术由 Armstrong 和 Henry 于 1979 年首先提出，采用低浓度表面活性剂的水溶液（或非极性有机溶剂并含有少量水）为流动相，以聚酰胺、氧化铝、硅胶或硅烷化的硅胶作为固定相。具有分离选择性高、流动相简单、无毒、价廉安全、适用性广（可同时分离亲水性组分和疏水性组分）等特点。

胶束液相色谱法 micellar liquid chromatography 以高于临界胶束浓度的表面活性剂（十二烷基硫酸钠）溶液代替有机溶剂、水溶液做流动相的液相色谱方法。溶质在固定相和胶束相以及水相之间进行分配而达到分离。在水溶液中形成的胶束称正相胶束，可用于反相液相色谱分离模式；在非极性溶剂中形成的胶束称反相胶束，可用于正相液相色谱分离模式。这一方法于 1979 年由 Armstrong 提出后受到很多研究者的重视，目前的应用主要是采用反相胶束液相色谱分析环境和药物样品。

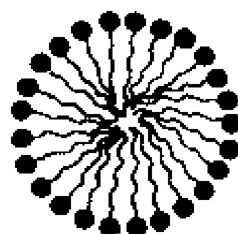
胶束增敏动力学光度法 micelle-sensitized kinetic photometry 将表面活性剂胶束对显色反应体系的增敏作用与动力学光度分析方法相结合的一类分析方法。参见**胶束增溶分光光度法**条。

胶束增敏流动注射分光光度法 micelle-sensitized flow injection spectrophotometry 将表面活性剂胶束对显色反应体系的增敏作用与流动注射分析技术相结合建立的，兼具灵敏度高和分析速度快等优点的一类分析方法。参见**胶束增溶分光光度法**条和**流动注射分析**条。

胶束增敏荧光法 micelle-sensitized fluorimetry 荧光体系中引入表面活性剂，利用其胶束的增溶、增稳，特别是增敏作用而建立的荧光分析方法。表面活性剂胶束为荧光物质提供了保护性微环境，可以减少分子间碰撞失活和其他猝灭作用，使荧光强度增强，从而使测定灵敏度显著提高。

胶束增溶分光光度法 micellar solubilization spectrophotometry 在金属离子-有机试剂显色反应体系中添加表面活性剂（Sf），利用Sf胶束的增溶、增敏、褪色、析相等作用，以提高显色反应灵敏度、对比度和（或）选择性，改善反应条件，并在水相中直接进行分光光度法测定的方法。由该法创立了许多表观摩尔吸光系数$\varepsilon \geq 10^6$的超高灵敏度的显色反应测定体系。由于新的增效试剂的开发，胶束增溶分光光度法的概念，已不再限于使用Sf，而是扩展到包括水溶性高分子、聚电解质、经修饰的环糊精及其衍生物等有序分子组合体存在的显色反应测定体系。

胶束增溶作用 *micellar solubilization* 各种物质在表面活性剂胶束水溶液中比在纯水中的溶解度明显增加的现象。当表面活性剂浓度大于其临界胶束浓度（*cmc*）值时，胶束即自发地生成。增溶作用是胶束的一个重要性质。为什么表面活性剂胶束能明显增大各种溶质的溶解度呢？这是因为胶束作为溶剂的显著特点是，既能为不同的分子提供不同的微环境，也能对同一分子的不同部位提供不同的微环境。增溶进入胶束的溶质分子可定域在从“似烃”的胶束内芯到完全的水介质（或至少是一种富含水的具有高电荷密度的界面）这样性质很不相同的微环境中，即胶束既可为极性分子提供一个极性的环境，又可为非极性的分子提供一个疏水的“似烃”介质，两亲分子可取向在胶束-水界面上，而它们的疏水部分则伸展进入“似烃”的内芯。如下图。



胶束增稳室温磷光法 micelle stabilized room temperature phosphorimetry; MS-RTP 流体室温磷光分析法的一种。利用表面活性剂胶束为磷光体提供一种更为刚性、有序的保护性微环境，减少碰撞失活和其他非辐射衰变过程，提高重原子与磷光体的接近程度以提高磷光体分子系间窜跃几率，并通过化学除氧来实现流体的室温磷光测量。实现MS-RTP的三要素是：表面活性剂浓度达到临界胶束浓度以上；有重原子存在；消除溶液体系中氧。

胶质层指数 plastometer indices 一种表征烟煤塑性的指标，以胶质层最大厚度*Y*和最终收缩度*X*等表示。它是模拟工业焦炉的炭化室，通过对特制煤杯中的煤样进行单侧加热，使其形成一系列的等温层面。各层面温度由加热端开始依次递降，并使煤杯中煤样相应形成半焦层、胶质层和未软化的煤样层三部分。在温度相当于固化点的层面以下形成半焦，在温度相当于软化点的层面以下形成胶质体，而在软化点层面以上是未软化的煤样。利用探针测量出胶质体的最大厚度*Y*，用它来表示煤的结焦性；根

据试验过程中得到的体积曲线可反映出胶质体的厚度、黏度、透气性以及气体的析出情况和温度间隔。在试验终了时测得收缩度 X，可用来表示试验终结时半焦收缩的程度。胶质层指数的测定过程反映了工业焦炉炼焦的全过程，人们可以通过研究胶质层的测定过程来研究炼焦过程的机理。胶质层最大厚度 Y 值直接反映了煤的胶质体的特性和数量，是煤的结焦性能好坏的一个标志。因此它被列为我国烟煤分类的一项工艺性指标，当黏结指数大于85时，可用 Y 值和挥发分确定煤的牌号，此外，利用 Y 值可以指导配煤炼焦。

焦耳热　joule heating　充满在毛细管内的电解质在高电场下产生的自热。

焦距　focal length　一束平行于透镜（或光学系统）光轴的光束，经透镜或光学系统折射后会聚（或光线的延长线相交）于光轴上某一点 F，此点称为透镜或光学系统的焦点。笼统地说，从透镜到焦点之间的距离称为焦距（严格说焦距应是透镜主面到焦点的距离）；正透镜将光束会聚得到实像点，因而其焦距值为正值，负透镜将光束发散，各发散光线的延长线才会相交得到虚像点，因而负透镜的焦距是负值。

焦深　depth of focus　指在保持像清晰度前提下，像平面沿镜轴可移动的距离即观察屏或照相底版沿镜轴所允许的移动距离。

角动量的耦合　coupling of momentum　原子中多个电子之间存在着包括“轨道”和自旋的相互作用，构成了原子的总角动量。考虑这种相互作用方式，划分为 L-S 耦合与 j-j 耦合两类。原子序较小的原子中各电子间轨道运动有较强的相互作用，可先将各电子的轨道角动量合成一个总的轨道角动量 $\boldsymbol{L}=\sum_i \boldsymbol{l}_i$（矢量加和）；而各电子的自旋角动量也合成一个总的自旋角动量 $\boldsymbol{S}=\sum_i \boldsymbol{s}_i$。然后，将两者再合成为原子的总角动量 $\boldsymbol{J}$。有 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$。这种角动量的耦合方式称为 L-S 耦合。原子序较大的原子中，各电子的轨道运动与其自旋运动相互作用比较强，因而可先考虑每个电子的总角动量 $\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{l}_i+\boldsymbol{s}_i$，而后再综合各电子的总角动量的相互作用，$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i$。这种方式称为 j-j 耦合。

角度异常　angular anomaly　见过击线条。

角分辨光电子谱　angular resolved photoemission electron spectroscopy; ARPES　对样品光电子发射进行角度分布测量和分析的光电子能谱。经过多次碰撞的光电子，在进入真空时，具有接近余弦分布的特性，没有碰撞的电子，它不遵从余弦分布定理，而具有光电子初态的轨道角动量特征。利用角分辨光电子谱，能得到样品的能带结构、表面原子的位置、相对基底的排列情况等丰富信息。

角色散率　angular dispersion　光谱仪用棱镜或光栅作为分光元件，它们的作用是使由同一方向入射的复色

光，经分光以后，取不同的偏向角。因此，当以固定入射角通过某一棱镜折射或经由光栅衍射的光线的波长由 λ 变至 $\lambda+d\lambda$ 时，偏向角相应地由 θ 变至 $\theta+d\theta$，角色散率即定义为$\frac{d\theta}{d\lambda}$。

校正 calibration 确定输入量与输出量之间关系参数的过程。现今大多数分析方法都是相对测定法，相同量的被测组分输入到分析系统中，在不同的条件下，得到不同的响应输出，因此，需通过实验找出被测定组分量与响应输出量之间的关系（在关系不明确时），确定校正系数。如在光度分析中，被测定组分的浓度与响应输出量（吸光度）之间的关系（比尔定律）已知，但需确定在不同测定条件下的摩尔吸光系数。回归分析是分析工作者最常用来建立校正关系的数学工具，通过回归分析建立标准曲线或校正曲线。

校正保留体积 corrected retention volume 经压力梯度校正因子 j 校正后的保留体积，用 V_R^0 表示，单位是ml，其关系式为 $V_R^0=jV_R$，式中，j 为色谱柱进口和出口压力梯度校正因子；V_R 为保留体积。由于气相色谱中色谱柱内存在压力梯度，因此色谱柱内不同截面上的气体流速也不同，通常采用平均流速 F_c 来表示，F_c 和色谱柱出口流速 F_0 的关系为 $F_c=jF_0$。参见压力梯度校正因子条。

校正曲线 calibration curve 又称工作曲线。用组成相同的或相似的标准试样经历全分析过程制作的、用以表征在给定分析条件下被测组分量或浓度与响应输出量之间关系的曲线。严格地说，它与标准曲线是有区别的，用纯标准溶液系列制作的标准曲线所确定的被测组分量或浓度与响应输出量之间关系系数，常常不能适用于复杂的实际样品的校正。

校正曲线法 calibration curve method 又称绝对定量法或检量线法。是色谱定量分析中常用的一种方法。它是将被测组分的纯样品配制成系列浓度的标样，然后定量进样进行色谱分析，以浓度对峰面积作图，得到的曲线即为校正曲线。在分析未知样品时，保持相同的色谱条件，尤其是进样量，得到未知样峰面积后，从校正曲线即可查出未知样品的含量。

校正因子 correction factor 又称绝对校正因子，其物理意义是单位色谱峰面积所代表的组分含量，用 f 表示。在做定量分析时，由于不同物质在同一检测器上有不同的响应能力，即使两种物质含量相同时，在检测器上得到的信号也往往不相同，因此在进行定量分析时必须加以校正。对 i 组分的校正因子 $f_i'=\frac{W_i}{A_i}$，式中，W_i 是 i 组分的含量；A_i 是 i 组分的峰面积。由于 f_i' 受操作条件影响较大，准确测定比较困难，在实际工作中多使用相对校正因子。

校正荧光光谱 corrected fluorescence spectrum 由于荧光光谱仪的光源能量分布、单色器的透射和检测

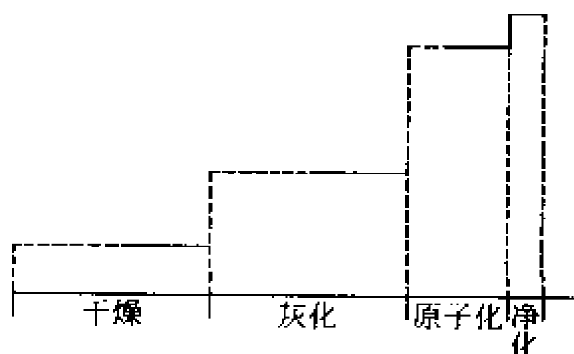
器的响应等特性随波长而变，一般情况下测得的荧光光谱是表观光谱。通过对测定光源、单色器、检测器的光谱特性进行光谱校正，可以获得比较接近真实荧光光谱的校正荧光光谱。可以用标准灯或用光量已知的激发光校正，目前大多数仪器本身带有可以进行光谱校正的软件。

校准 calibration 在规定的条件下，确定测量仪器、测量系统的示值或实物量具与相对应的被测量的已知值之间关系的一种操作。用于评定测量仪器、测量系统或实物量具的示值误差，给任何标尺上的标记赋值，确定其他计量特性等。校准结果用校准因素或以校正曲线形式表达的一系列校准因素来表示。校准时必须依照所规定的技术程序进行。校准和检定是两个既有区别又互相联系的概念，如果校准是检定工作中示值误差的检定内容，则它就是检定的一个组成部分，如果只是确定误差以得到修正值，则不是检定。

阶梯减光板 step weakener 是置于狭缝前面用于适当减弱人射光强度的光谱仪部件。为使紫外光也能通过，常用石英片制造。在石英片上喷镀的铂或铝薄层，对不同波长的光起同样的减弱作用，无选择性（称中性减光作用），而透过后的光强度减弱程度则取决于不同部位上所镀铂层或铝层的厚度。当将其置于狭缝前，则摄得谱线在长度方向有不同的黑度阶梯，此即阶梯减光板。一般使用的有二阶梯、三阶梯、六阶梯或九阶梯的减光板，各阶梯的透过率是已知的，阶梯减光板可提供作乳剂特性曲线用的强度标。

阶梯扫描伏安法 staircase voltammetry 在极化电极上施加的电位的变化呈小等分恒定阶梯形，然后选择合适的方式和时间进行电流采样的方法。该法有利于提高信噪比，从而提高方法的灵敏度，也更有利于电化学仪器的微机化。从整体而言，该法还处于发展阶段。

阶梯升温程序 stepped temperature program 电热石墨炉原子化器的一种升温程序，按照原子化过程的干燥、灰化、原子化和空烧除残四个阶段分步脉冲式升温。如下图。由于陡然升温，易引起试样飞溅，所设置的某一个灰化温度，很难适合于复杂试样中各个组分，有些基体组分不易除尽，造成分子吸收背景，另一些基体组分的快速蒸发或挥发又会引起被测元素的损失。新近的一些商品仪器有了改进，将原子化过程分为更多的（多至9个）阶段分步升温，对于基体复杂的试样，可设置两个或更多的不同温度下的干燥和灰化阶段，对样品反复处理，以便将基体除尽，消除基体干



扰，又不造成被测元素的挥发损失。

阶梯梯度 stagewise gradient 在某一时间点、直接从某一低强度的流动相改变为另一较高强度的流动相的梯度程序。

接力相干转移谱 relayed coherence transfer spectroscopy; RCT 也称为接力同核位移相关谱; RCOSY。它可将化学位移相关（COSY）谱中相关核通过中介核延续寻找出相关。其脉冲序列为

$$90°_x - t_1 - 90°_{\phi1} - \frac{\tau}{2} - 180°_{\phi1} - \frac{\tau}{2} - 90°_{\phi2} - \text{采集 FID}$$

一个同核三旋体系（AMX），若 J_{AM}，J_{MX} 皆非零，J_{AX} 为零。则常规 COSY 谱出现关于 A-M 及 M-X 的相关峰（交叉峰），而A-X无交叉峰。脉冲序列的前两个 90°脉冲实现了 A 到 M 核的磁化转移，经 $\frac{\tau}{2} - 180° - \frac{\tau}{2}$ 脉冲作用，则重聚化学位移的影响并为 M 到 X 核的相干转移做准备，在最后 90°脉冲作用下得以实现，从而在 RCT 谱中不仅出现 A-M、M-X 的交叉峰，还出现 A-X 的交叉峰，M 核起了接力作用。当体系存在着两个独立的三核体系（$A_1M_1X_1$，$A_2M_2X_2$），而 M_1，M_2 的化学位移又偶然重合，COSY 不能分辨 A_1 与 X_1 或 A_2 与 X_2 的连接关系，但 RCT 的 A_1X_1，A_2X_2 的交叉峰的出现可确认 A_1-X_1，A_2-X_2 的连接关系。

接受域 acceptance region 在统计检验中，以（$1-\alpha$）概率正确接受原假设 H_0 的概率区间，其中 α 为约定的显著性水平。检验统计量是一个随机变量，由一次抽样检验所得的统计量值以一定的概率出现。在对原假设 H_0 进行统计抽样检验时，即使原假设 H_0 不正确，在某一次抽样检验时，所得到的统计量值仍有可能以一个小的概率 β 出现在接受原假设 H_0 的区域，从而错误地接受原假设 H_0；反之，即使原假设 H_0 正确，在某一次抽样检验时，所得到的统计量值也可能以一个小的概率 α 出现在拒绝原假设 H_0 的区域，从而错误地拒绝了原假设 H_0。（$1-\alpha$）是原假设 H_0 为真时正确接受它的概率。

洁净室 clean rooms 一般实验室空气中含有颗粒性尘埃和气态污染物，在这种暴露的条件下进行分析操作，将可能会对样品造成纳克（10^{-9}g），甚至微克（10^{-6}g）量级的污染。显然，在进行超痕量物质的分析（或需要超纯制备）时，必需利用洁净室、洁净通风柜和工作台等封闭装置来减少空气污染，为此专门设计的房间，称为洁净室。经高效粒子空气过滤器过滤后的空气连续地送入洁净室内，并循环使用和补充，这种空气过滤器由多孔的超细纤维（直径小于 1μm）薄板、100%玻璃纤维板或玻璃纤维与石棉纤维的合成板制成。标准的高效粒子空气过滤器对 0.3μm 颗粒的最低过滤效率为 99.97%。根据需要还可选用更高级的，例如，对 0.1μm 颗粒的过滤效率为 99.99%的空气过滤器，气态污染物由活性炭过滤器消除。根据气流

方式，洁净室可分为非层式气流型、水平层式气流型和垂直层式气流型洁净室，后一种洁净室效果最好，但价格最贵。

结构半不变量 structure seminvariant 由晶体结构所决定，不因晶胞原点在允许原点之间变动而改变的物理量。例如：对于空间群 $P\bar{1}$ 而言，衍射 hkl 的指标 h、k、l 若均为偶数，则其相角 α_{hkl} 就是一个结构半不变量。因为，当原点从一个对称中心［如：（0，0，0）］移至另一个对称中心［如：（0.5，0.5，0.5）］时，其值不会改变。两个或多个衍射，其衍射指标的线性组合如果都是偶数，则这些衍射的相角的线性组合也是结构半不变量。如 $\alpha_{211}+\alpha_{212}+\alpha_{241}$ 就是一个结构半不变量。

结构不变量 structure invariant 惟一地由晶体结构所决定，而与晶胞原点的选取无关的物理量。例如：结构振幅是一种结构不变量，但结构因子不是结构不变量，因为相角不是结构不变量。然而几个衍射的相角的线性组合有可能是结构不变量，例如：当 $h_1+h_2+h_3=0$，$k_1+k_2+k_3=0$，$l_1+l_2+l_3=0$ 时，则衍射 $h_1k_1l_1$，$h_2k_2l_2$ 和 $h_3k_3l_3$ 的相角 α_1，α_2 和 α_3 的线性组合是一个结构不变量，即：$\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=$ 常数。

结构分析 structural analysis 分析化学的一个分支。任务是研究物质的分子结构或晶体结构、结构与性质的关系，为研究物质性质和制备新的化学物质提供可靠的依据。

结构基元 structural motif 晶体结构在三维空间中周期性重复排列的最基本单位。它对应于晶体点阵中每个点阵点所代表的具体内容，包括原子、离子或分子的种类和数量及其在空间中排列的方式。每个结构基元的化学组成、空间结构及周围的环境必须相同。若结构基元被抽象为一个点，则整个晶体被抽象为一个点阵。反之，赋予点阵点以具体的内容，点阵也就还原为晶体结构了。因此，晶体结构的简单表达方式之一是：晶体结构 = 点阵 + 结构基元。

结构因子 structure factor 晶胞在衍射 hkl 的衍射方向上对 X 射线的散射能力。结构因子 F_{hkl} 由结构振幅 $|F_{hkl}|$ 和相角 α_{hkl} 两部分内容所组成，表示为 $F_{hkl}=|F_{hkl}|\exp[i\alpha_{hkl}]$。结构因子的大小取决于晶胞中各个原子对 X 射线的散射能力和晶胞内原子排列的情况，其表达式为

$$F_{hkl}=\sum_{j=1}^{n}f_j\exp[i2\pi(hx_j+ky_j+lz_j)]$$

式中，f_j 为第 j 个原子在衍射方向上的原子散射因子；x_j,y_j,z_j 分别是第 j 个原子在 x,y,z 轴上的分数坐标。

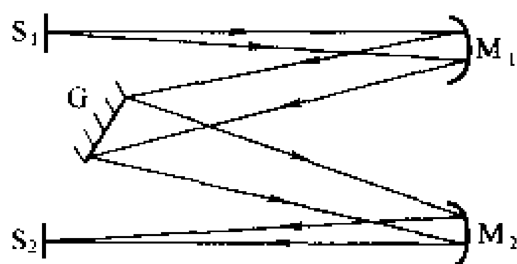
结构振幅 structure amplitude 结构因子的模量。其物理意义为：在衍射 hkl 的衍射方向上，晶胞内全部电子的散射波叠加而成的复合波的振幅与位于晶胞原点上的经典点电子的散射波的振幅之比值。结构振幅 $|F_{hkl}|$ 的平方值与实测的衍射强度 I_{hkl} 成正比，即：$I_{hkl}=k|F_{hkl}|^2$。

结合能 binding energy 各个粒子

从自由状态结合为一个复合粒子时所放出的能量，即把一个复合粒子分为各个自由粒子所必须给予的能量。结合能的数值越大，分子或原子核就越稳定。分子的结合能以电子伏（eV）为单位。原子中具有各种壳层的原子轨道，其结合能是不同的。在光电子能谱研究范围内，价轨道的电子的结合能为几个电子伏特，而内层轨道电子的结合能从几百到上千电子伏。

结晶谱带 crystalline band 分子在形成晶体时，常伴随着谱带分裂、谱带强度的改变、新谱带的产生和旧谱带的消失，这些新产生的吸收谱带或分裂谱带称为结晶谱带。结晶使分子空间排列规整，妨碍自由内旋转，使得吸收谱带变得较尖锐。产生结晶谱带的原因较多，如长链脂肪酸在 1170 ~ $1350cm^{-1}$间的 CH_2 扭转和垂直摇摆振动，由于结晶而使分子中的 CH_2 形成规整排列而产生有规律的吸收谱带系。聚乙烯中 CH_2 在 $720cm^{-1}$的振动是由于两个分子链段通过一个晶胞，产生强烈的分子间作用，使 $720cm^{-1}$ 谱带发生分裂。

捷尔尼-特尔纳型装置 Czerny-Turner mounting 一种广泛用于单色仪的光学装置。该装置使用两块凹面反射镜，除了对称式装置外，还可采用非对称式装置，从而比较完善地校正相差，有利于大孔径的仪器，使在较大的衍射角时不会像垂直对称式装置那样产生谱线倾斜。其装置如下图。



S_1—入射狭缝，M_1—准直镜，
G—平面光栅，M_2—照相物镜，
S_2—出射狭缝

截距 intercept 直角坐标系原点至回归直线与纵坐标 y 的交点之间的距离。即回归直线 $y=a+bx$ 中的 a，是由系统误差引起的固定偏倚。

截止滤光片 cut-off filter 滤光片是用来从宽谱带光源中分离出窄谱带光束的一种仪器部件。截止滤光片将所考虑的光谱区分为两部分：一部分不允许光通过，称为截止区；另一部分要求光通过，称为通带区。根据通带在光谱区的位置又分为长波通和短波通两种。这种滤光片的特性是透光部分的透射率接近于100%，而其他部分透射率迅速下降为零。

截趾处理 apodization treatment 一种提高信噪比的数据处理方法。自由感应衰减（FID）信号应延伸到无穷远的时间，但实际上只在采集时间 AQ 内取数据，相当于 FID 信号尾部被截断了。若 $AQ<3T_2^*$ 则采集时间后仍有可检测信号，这种截断相当于对 FID 信号乘上一个矩形窗（口）函数，经 FT 后主峰两旁呈现衰减的小峰基线不好，此即截断效应。对 FID 尾部乘一函数使其末尾变为零，

可减低截断效应。也可乘线性函数或余弦函数，这些过程称为截趾处理。

解蔽 demasking 掩蔽作用的解除过程，它能使被掩蔽的组分（如离子）重新释放出来以实现分析测定。解蔽可以是加入另一种试剂使其与掩蔽剂作用而释放出被掩蔽的组分；也可以是先分离出掩蔽络合物，然后利用掩蔽剂的热分解性质（如氰基络合物的热分解）将其分解后测定被掩蔽的组分。参见**掩蔽**条。

解卷积法 deconvolution method 实验测得的红外光谱是真实光谱与仪器线形函数卷积的结果，此卷积降低了光谱的分辨率而使谱宽加大。去除这个线形函数的影响称为解卷积或去卷积。从而可提高光谱的表观分辨率，将重叠的谱带分解成各个子谱带，达到分峰的目的。解卷积可以保留吸收峰的积分面积，并能提供定量的信息。由于在傅里叶变换时 x 的积分限不可能从 $-\infty \to +\infty$，解卷积时需对干涉图进行截断，为此解卷积后的光谱分辨率的提高是有限的，且受截断函数的影响。由此可知，对一个光谱进行解卷积时，首先要将它变成干涉图，再选取一个截断函数与干涉图相乘，然后再进行傅里叶变换才能完成全部的解卷积运算。

解卷积技术 deconvolution technique 光谱解卷积技术主要有两种计算方法。一种是根据 Vancittert 方法建立的迭代法，这种方法用于研究光栅光谱仪和差频激光光谱仪记录的气相红外光谱。另一种方法是利用傅里叶变换进行的傅里叶解卷积法，也称傅里叶自解卷积。傅里叶解卷积技术是一种从叠谱中获得隐含信息（结构含量等）的有效方法。参见**解卷积法**条。

解链酶 unwindase 催化脱氧核糖核苷酸的双链解开的酶称为解链酶。它可使脱氧核糖核苷酸进行复制。

解吸电离 desorption ionization 质谱分析中，从冷凝相中直接解吸出气相离子的电离法的总称。例如：场解吸（FD）、快原子轰击（FAB）、等离子体解吸（PD）、激光解吸（LD）、基质辅助激光解吸电离（MALDI）等。

介电常数 dielectric constant 由偶极定向极化而产生的描述电介质性能的参数，介电常数的测定在有机物结构的研究和物质的定量分析以及吸收光谱的解释中是很有用的。

介电常数检测器 dielectric constant detector 又称电容检测器。基于溶质与流动相溶剂介电常数的差别的检测器。其检测头为一对平板或圆筒形电极，电极间空隙体积只有几微升，在两电极间加一个稳定的高频电流，当含溶质的柱流出物流过电极时，因介电常数的变化而引起高频电流的变化，这种高频电流的变化与溶质浓度成正比。因为很容易选择到一种与溶质介电常数不同的溶剂作流动相，所以，这种检测器是一种通用型的检测器。其灵敏度不如紫外检测器高。

界面 interface 是指具有不同元素、化学或物理性质的两种体相之间的边界。一般界面宽度的界定是用在两种不同基质的连接处测量得的某信号强度从其最大值的16%增加到84%或从84%降到16%时两点之间的距离。两种基质的厚度应该在该界面距离的6倍以上，才能保证测量的准确性。

界面电势 interfacial potential 电化学池相界面所存在的电位差。一个电化学池，如丹尼尔电池，Cu（导线）| Zn板 | $ZnSO_4$ 溶液 | $CuSO_4$ 溶液 | Cu板，其中用“|”表示相界面，这些金属和金属，金属和溶液，溶液和溶液的相界面存在电位差。

界面分析 interface analysis 在样品表面分析中，不仅需要知道样品表面的成分、价态和结构，还需要了解薄膜和薄膜、薄膜和基底的界面上的化学状态。对界面上的元素成分、化学价态以及结构的分析称为界面分析。由于界面在表面的内部，一般直接的方法很难获得界面的信息。在界面分析中，一般是逐渐剥离表面原子，同时对剥离后的表面成分进行检测，这样就可以获得界面上的各种物理化学信息。

金电极 gold electrode 一种经常使用的，用金作材料制成的电极，常用来测定正电位一侧的电化学反应。

金属电沉积 metal deposition 在外加电压下使电解液中的金属离子在阴极沉积出来的过程。

金属电极 metallic electrode 以金属材料作为基体的电极统称金属电极。根据金属在电极反应中的化学作用，金属电极可分为三类：（1）活性金属电极，如铜浸入含铜离子的溶液中，电极可用 Cu/Cu^{2+} 符号表示；（2）金属及其难溶性盐所形成的电极，如甘汞电极等；（3）惰性金属电极，金属只起导电和载体作用，具有抗腐蚀性，且不与水反应，如铂电极插在含 Fe^{3+} 及 Fe^{2+} 离子的溶液中，可用 Pt/Fe^{3+}，Fe^{2+} 表示。

金属配合物离子色谱法 metal complex ion chromatography; MCIC 又称金属络合物色谱法。是使被测金属离子与适当的有机配位体作用，形成金属配合物（中性分子、配阴离子或配阳离子）后，采用通常的高效液相色谱体系分离和检测的一种色谱方法。因为它的分析对象是金属离子，所以也可以作为一种离子色谱法讨论。

金属压热器 metal autoclave 用于高温分解样品的金属密封加热容器，温度可达1000℃、压力10MPa。适于分解有机基质样品，测定其中的非金属痕量成分，如硅、砷、硫、卤素等，特点是分解充分，可防止挥发损失。

金属氧化物固定相 metal oxides stationary phase 固定相填料为未经修饰的或进行了表面处理（修饰或改性）的金属氧化物微粒（微粉）。常用的金属氧化物固定相有氧化铝、氧化锆、氧化钛等，有的用作吸附

剂，也有的用作离子交换剂。

金属指示剂 metal indicator 一种能与金属离子生成有色配合物，用以指示配位滴定中金属离子浓度的变化和滴定终点的显色剂，简称金属指示剂。其原理是：滴定终点前，金属指示剂（In）与被滴定金属离子（M）反应，生成一种与指示剂本身颜色明显不同的配合物，滴入 EDTA 时，金属离子被络合浓度逐渐降低，当接近滴定反应的化学计量点（滴定终点）时，已与指示剂络合的金属离子被 EDTA 夺出，释放出指示剂，引起溶液颜色的突变指示滴定终点的到达。显然，只有满足如下条件的显色剂才可考虑用作金属指示剂：（1）MIn 的颜色与 In 的颜色明显不同；（2）M 与 In 的反应灵敏、迅速，有良好的变色可逆性；（3）络合物的稳定性适当，既要有足够的稳定性，但又要比 M-EDTA 络合物的稳定性低；（4）In 本身要稳定，便于贮存和使用。

金属中气体分析 gas analysis in metals 对金属中以金属化合物、固溶体、气孔或气泡形式存在的氧、氢、氮进行的分析。控制金属中的气体含量对保证金属的力学和物理性能意义重大，超纯金属和半导体材料等中的气体含量甚至要低至 10^{-9} 数量级。常用的气体分析方法有熔融抽取法、化学分析法、物理分析法和浓差电池法等。分析金属表面的气体还可以用电子能谱、穆斯堡尔谱、二次离子质谱和扫描电镜等方法来进行。

金属作用色谱 metal interaction chromatography 又称固定金属离子亲和色谱。指结合在固定相表面螯合基团上的金属离子是溶质保留和分离的主要因素的色谱方法。它是亲和色谱的延伸，固定在螯合环中的金属离子可以有效地结合蛋白质、肽类等生物样品，在生物样品的分离与制备中得到了应用。

紧密层 compact layer 又称 Helmholtz 层或 Stern 层。实验证实，电极和溶液界面存在双电层，最紧邻电极表面的一层称为内层，由溶剂分子和特性吸附的离子或分子组成。特性吸附离子的电荷中心构成内 Helmholtz 平面，最接近电极表面的溶剂化离子的电荷中心构成外 Helmholtz 平面。

近红外傅里叶变换表面增强拉曼光谱 near-infrared Fourier transform surface-enhanced Raman spectroscopy; NIR-FT-SERS 用近红外傅里叶变换拉曼光谱仪来进行表面增强拉曼光谱所得到的光谱。它将近红外傅里叶变换拉曼光谱仪检测速度快、无荧光干扰的特点，和表面增强拉曼光谱的增强效果完美地结合在一起。已在电化学过程、腐蚀机理的研究中得到应用。

近红外光谱学 near infrared spectroscopy 研究分子在近红外区（NIR，0.75 ~ 2.5μm 或 13333 ~ 4000cm^{-1}）能量较低的电子跃迁和分子振动状态间的吸收。在中红外区主要是分子振动基频吸收，而在 NIR 区由于频率较高，主要是分子振动的

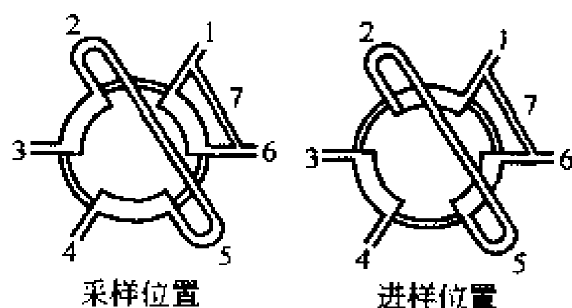
倍频吸收与合频吸收。近红外光谱有透射和漫反射两种测量方式。它主要用来研究含氢原子的官能团如C—H、N—H、O—H 等的化合物，如醇、酚、胺、不饱和碳氢化合物、末端亚甲基、环氧基、顺反双键、水、某些高分子、稀土和过渡金属离子化合物等。它在农产品及其加工品和各种生物物料分析、药物快速检验，石油化工生产在线控制和成分分析方面得到广泛的应用。近十年来，随着各种化学计量学算法的发展，通过应用各种数学算法提取信息，NIR 光谱用作定性分析，可对样品进行分类；用于定量分析具有无污染、制样简单，不破坏样品、可以实现多组分同时定量分析、方法快速，仪器较便宜、运行成本低等优点。

近红外光源 near infrared source 常用的近红外光源有钨灯和卤钨灯，使用波数范围为 15000 ~ 4000 cm^{-1}。特点是能量高、寿命长、稳定性好。

近红外检测器 near infrared detector 近红外常用的检测器是锑化铟检测器，分为光电导型（77K）、光伏型（77K）和光磁型（293K）。FTIR 光谱仪测量中较多的是用光电导型和光伏型，在液氮 77K 冷却下工作，低频端截止波长为 1800cm^{-1}，高频可测至 10000cm^{-1}。因为它是在液氮温度下工作，所以噪声小，灵敏度高。还有一种近红外检测器是硒化铅 PbSe，它利用光电导效应测量，可在干冰（195K）和液氮（77K）下工作。除此之外，还有硫化铅（PbS）和硅（Si）等近红外探测器。

近红外区 near infrared region; NIR 近红外谱区是介于可见谱区与中红外谱区之间的一段谱区，其波数范围为 13300 ~ 4000cm^{-1}。NIR 谱区中所包含的信息主要是分子中原子间振动的倍频（即分子吸收一定的辐射时，振动能级从基态跃迁到第二或第三激发态时所产生的吸收峰）和组合频（两种基频跃迁的加和），其信息量与中红外区相当，多以含 H 原子的基团为主，如 O—H，N—H，C—H 等。

进样阀 injection valve 又称阀进样器。是将样品准确定量地导入色谱体系的多通阀。最常用的是六通阀进样器，其结构如下图所示。进样体积由样品环确定。操作时先将阀柄置于采样位置，这时进样口只与样品环接通，处于常压状态，用微量注射器注入样品溶液，样品停留在样品环中。将进样器阀柄顺时针转动 60°至进样位置时，流动相与样品环接通，样品被流动相带到色谱柱中。



六通阀进样器工作原理

1—接色谱柱；2，5—样品环；3—进样口；4—废液口；6—泵接口；7—分流管

进样量 sample size 通过进样器

导入分析仪器的样品质量或进样溶液体积。在色谱分析中，通常是用微升或纳升表示进样量。

进样器 injector 色谱仪中用来将样品准确导入色谱体系的装置。分手动和自动两种方式。进样器要求密封性好，死体积小，重复性好，进样时引起色谱系统的压力和流量波动要很小。进样方式有隔膜进样、停留进样和阀进样。现在的液相色谱仪所采用的手动进样器几乎都是耐高压、重复性好和操作方便的阀进样器。

进样舟技术 sampling boat technique 一种火焰原子化技术。是将试样置于钽舟或钨舟内，预先予以干燥，然后将试样舟放入火焰中，试样被迅速原子化，得到锐的吸收信号峰。后经改进，在舟上方放置一开口石英管，光束从管中通过，增加了有效吸收光程，试样在管中原子化，又延长了原子在管内的平均停留时间。特点是进样量大，进样量可达 1ml，测定的相对灵敏度高，检出限比常规火焰原子吸收法改善 20～50 倍。试样舟的温度较低，只能达到 1200℃，只适用于锌、铋、镉、铅、汞、银、硒、碲、铊等易原子化元素的测定。上述这些元素正是环境控制分析和生物医学感兴趣的元素，因此，在这些领域中获得广泛的应用。

浸取过程 leaching process 也称浸出过程。是用某种溶剂把有用物质从固体原料中提取到溶液中的过程，所得的产物为浸出液，余下的不溶性固体常被称为渣或载体。在工业中，浸取是常用的分离过程之一，如在湿法冶金工业中用浸取过程把矿石中的有效成分与脉石分开，在食品、医药和化工中用来提取有效成分。

禁忌线 forbidden line 在 X 射线荧光光谱学中，对应于不满足选择定则的电子跃迁的谱线。

禁阻跃迁 forbidden transition 在某种近似规则制约下本不应产生却在其他因素影响下产生的一种原子、分子、原子核能级间的跃迁。比如分子吸光跃迁时产生的吸收光谱，不同波长下的摩尔吸光系数差别很大。跃迁几率大的摩尔吸光系数也大，跃迁几率小的摩尔吸光系数也小，前者为允许跃迁，后者是禁阻跃迁。三线态-单线态跃迁也是禁阻跃迁，因此磷光寿命通常比荧光寿命长很多。

经典光散射 classical light scattering 见弹性光散射条。

晶胞 unit cell 按照晶体内部结构的周期性所划分出来的大小和形状完全相同的平行六面体。晶胞是晶体结构的基本单位，对晶体结构的研究可归结为对一个晶胞的研究。晶胞的两个基本要素是：晶胞参数和晶胞中原子的种类及坐标参数。前者表示晶胞的大小和形状，坐标参数则表示晶胞内部各原子的相对位置。有了这两方面的数据，整个晶体的空间结构也就清楚了。晶胞是人为划定的，所以可以有无穷多种取法。以晶体点阵中 3 个不共面的最短点阵矢量作为基矢而构成的平行六面体，称为单胞、素晶胞或初基晶胞。但单胞的划定仍然

不是惟一的，只有按照 Niggli 约化条件选取的单胞才是惟一的，称为还原晶胞或是约化晶胞。

晶格分辨能力 lattice resolution 电子透射电镜的一项重要性能指标。其测定方法为利用外延生长方法制得的定向单晶薄膜作为标样，拍摄晶格像。根据仪器分辨本领的高低，选择晶面间距不同的样品做标样测得。

晶格缺陷 lattice defect 晶体内部周期性遭破坏的地方称为晶格缺陷。晶格缺陷有很多种，如点缺陷、线缺陷、位错、层错等。

晶格像 lattice image 透射电镜中物镜光阑接收一个或多个布拉格衍射时形成的晶格条纹像。是通过入射束和至少一支衍射束一起成像所形成的干涉像。使用直接和间接分辨的晶格像能够检测试样中的缺陷并确定其位置。

晶格振动 lattice vibration 单位晶胞中整个分子、离子或高分子的一个链段的相对运动所产生的振动。若单位晶胞中含有 P 个分子，则有 3 $(2P-1)$ 个晶格振动模式，其中 3 $(P-1)$ 个为平动型晶格振动，$3P$ 个为转动型晶格振动。因分子内原子之间的作用力比分子之间的作用力大，分子内的振动频率高，晶格振动频率低，而晶格振动中的扭动或摆动又比平动的强度大。由于晶格振动受分子间作用力支配，因此出现在低频远红外光谱中。

晶核 crystal nucleus 结晶过程中首先形成的晶体的胚芽。沉淀的形成大致可分为晶核的形成和晶核的成长两个阶段。在过饱和溶液中，构晶离子因静电作用逐步形成离子对、离子群并成长到一定大小的颗粒称为晶核。通常晶核仅含数对构晶离子，不同的沉淀所含构晶离子数目不同。晶核的形成分为均相成核和异相成核。例如，$BaSO_4$ 的均相成核过程是在其在过饱和溶液中，Ba^{2+} 和 SO_4^{2-} 因静电作用缔合为离子对（$Ba^{2+}SO_4^{2-}$），离子对进一步结合 Ba^{2+} 或 SO_4^{2-} 形成离子群，离子群成长到一定大小时，就成为晶核。$BaSO_4$ 的晶核约由 8 个（4 对）构晶离子组成。参见**均相成核作用**条。

晶面指标 Miller indices 表示晶面在晶轴坐标系中取向的符号，记为 (hkl)，又称密勒指数。晶面指标 (hkl) 是晶面在 3 个晶轴上截距的倒数比，h、k、l 应是 3 个互质的整数。如果晶面与某一晶轴平行，则与该轴对应的指标为 0。当对晶体的宏观晶面进行指标化时，一般将晶轴系的原点放在晶体中心，外形中两个平行的晶面一个为 (hkl)，则另一个为 $(\overline{hkl})$。

晶体 crystal 由原子或分子在空间按一定规律周期重复地排列构成的固体物质。晶体内部各个部分的宏观性质是相同的，但在晶体中不同的方向上具有不同的物理性质（如电导率、热膨胀系数、折射率等）。

晶体场分裂参数 crystal field splitting parameter 反应晶体场分裂大小

的参数，一般用场强参数 Dq 表示。在晶体场中中心原子（或离子）的 d（或 f）电子受到周围配体原子或离子的库仑静电场的作用，原本简并的中心原子（或离子）的 d（或 f）轨道解除简并，发生能级分裂。能级分裂的状况及大小由晶体场的对称性和强弱决定。例如，对于 d^1、d^9 离子，在 O_h 对称晶体场下五个 d 轨道分裂成 t_g 和 t_{2g} 两组能级，其能级差 10Dq。对于 d^n（或 f^n）离子，当考虑到自旋-轨道相互作用时，还需考虑静电参量 B、C，有时将 B、C、Dq 三个参量都称为晶体场分裂参数。

晶体点阵 crystal lattice 描述晶体结构周期性规律的抽象点阵，又叫晶体结构的空间点阵。如果将晶体中按一定周期重复出现的原子、离子或分子看做是一个结构基元，进而将结构基元抽象成一个几何点，这些与周期中所含的具体内容无关的点的集合，称为晶体点阵，它反映了晶体结构在三维空间的周期性。晶体点阵在空间上应该是无限的，每个点阵点周围的环境都是完全相同的。

晶体控制发生器 crystal control producer 是他激发生器中应用最多的一种，它利用振荡频率十分稳定的石英晶体作为振源，经过电压和功率放大后，产生具有一定功率和频率的高频信号，用以产生和维持等离子体放电。石英晶体固有振荡频率为 6.78MHz，经过二次倍频后频率达到 27.12MHz，经电压放大和功率放大后达到 1～2kW 的功率输出，供给等离子体放电。这类发生器的基本数据频率为 27.12MHz，功率稳定性为 ±0.3%，频率稳定性为 ±0.05%，反射功率 < 10W，输出功率为 1～5kW。还有一种发生器频率为 40.08MHz。它是由电波管理制度所规定的。

晶体学点群 crystallographic point group 晶体结构中可能存在的点对称操作群。晶体具有空间点阵式的结构，晶体中允许存在的宏观对称元素只有对称中心、镜面和轴次为 1、2、3、4、6 的旋转轴及反轴。将晶体中可能存在的各种宏观对称元素通过一个公共点按一切可能性组合起来，总共有 32 种型式，和这 32 种型式对应的点对称操作群称为晶体学点群。了解晶体所属的点群对测定晶体结构、研究晶体的物理性质等十分重要。

晶系 crystal system 各种晶体按其点群对称性所作的分类。根据晶体所具有的特征对称元素可将其分为七种晶系，这七种晶系又可以分为三类：立方晶系含有一个以上的高次轴，对称性最高，称为高级晶系；六方晶系、四方晶系和三方晶系都只含有一个高次轴，至少有两个晶轴单位长度相等，对称性比立方晶系低，称为中级晶系；正交晶系、单斜晶系和三斜晶系不含有高次轴，相应晶胞的三个边长均不等，对称性最低，称为低级晶系。

晶向 crystal orientation 在研究晶体的各向异性时，对晶体某一指定的方向称为晶向。在拉曼光谱中，可由

偏振测量来得到不同晶向的拉曼光谱，研究其各向异性的特定物性。

晶形沉淀 crystalline precipitation 沉淀按其物理性质不同，可粗略地分为晶形沉淀（如 $BaSO_4$、$MgNH_4PO_4$ 等）、无定形沉淀（如 $Fe_2O_3 \cdot xH_2O$ 等）和介于两者之间的凝乳状沉淀（如 AgCl 等）。它们的主要区别是颗粒的大小。晶形沉淀颗粒最大，其直径在 0.1 ~ 1μm 之间，内部排列规则、结构紧密。生成的沉淀属于哪种类型，主要取决于沉淀的性质，但也与沉淀时的条件和后处理亦有关。一般说来，溶解度大的易形成晶形沉淀，溶解度小的易形成无定形沉淀。

精蛋白 protamine 是真核生物精子染色质中的主要蛋白质组分，由此称为精蛋白。它是富含碱性氨基酸（如精氨酸）的低分子量（约 5000）的单纯蛋白质，多数与核酸紧密结合，少数精蛋白与酸性蛋白结合。精蛋白可以嵌进 B-DNA 的主沟之中。

精馏 fractional distillation 又称"分馏"。蒸馏方法之一。在精馏塔内同时进行多次部分气化和部分冷凝以分离液体混合物的方法。操作时，由塔釜液体沸腾产生的蒸汽，在上升的过程中，与由塔顶冷凝器凝结、向下流动的部分回流液体密切接触，使液相中含越来越多的难挥发组分，容易挥发的组分不断富集于气相中，得到多次重复简单蒸馏的效果。按操作方法的不同，可分为：（1）连续精馏——料液不断从塔中部送入，塔顶馏出液与塔釜残液不断排出，主要用于大规模生产；（2）间歇精馏——料液一次送入塔釜中，精馏进行到釜中液体达到预期组成时，即排出，并重新加料，用于小规模生产或对产品进行提纯等。广泛用于石油、化学、冶金等工业中。

精密度 precision 在规定条件下多次重复测定同一量时各测定值彼此相符合的程度，表征测量结果中随机误差的大小。精密度通常用标准偏差或相对标准偏差表示，有时也用极差表示，少数情况也用算术平均差表示。精密度同被测定量值的大小有关，在报告精密度时，应指明获得该精密度的被测定量值的大小或浓度。好的精密度是获得好的准确度的前提，精密度不好，不可能获得好的准确度；但精密度好，未必就肯定能获得好的准确度，因为系统误差的存在不影响精密度，但影响准确度。精密度分室内精密度与室间精密度，前者是指一个分析人员在同一条件下于短期内重复测定某一量所得到的测定值彼此之间相符合的程度；后者是指在不同的实验室由不同分析人员在不同条件下重复测定某一量所得到的测定值彼此之间相符合的程度。

精密度控制 precision control 在分析测试中为控制测试结果的随机误差在所允许的范围内所实施的全部有计划有系统的技术与管理活动。采取适当的技术与管理措施使同一分析人员用同一分析仪器与方法对同一量相继进行两次重复测定的重复性 $r \leq 2.83S_r$，n 次重复测定的重复性

$r_n \leqslant k_n S_r$，S_r 是单次测定的标准偏差，k_n 为对测定次数的校正系数，可由统计书和手册中查得。不同分析人员在不同仪器上于不同或相同的时间内用同一分析方法对同一量进行两个单次测定的再现性 $R \leqslant 2.83 S_R$，各分别进行 n_1、n_2 次重复测定的再现性 $R_n \leqslant \sqrt{R^2 - r^2\left(1 - \frac{1}{2n_1} - \frac{1}{2n_2}\right)}$，$S_R$ 是实验室间测定的标准偏差。

精确质量测定 exact mass measurement 以 ^{12}C 的质量 12.00000000 为标准，任何一种同位素原子量都不是整数。如 $^{1}H = 1.00782503$、$^{14}N = 14.00307407$、$^{16}O = 15.99491462$，由不同的同位素构成的离子的质量也都不是整数，如 $C_{17}H_{16}$ 质量为 220.1252，$C_{14}H_{20}S$ 质量为 220.1286。因此精确的测量离子的质量，可以准确无误的定出离子的元素（同位素）组成。通常是采用高分辨质谱仪器准确进行测定，称精确质量测定。

精细结构 fine structure 在多种谱图中，由于电子自旋角动量的作用产生能级的分裂，导致谱线分裂，形成多重结构，称为精细结构。在原子光谱中，由于原子中电子的自旋轨道相互作用，使能级存在多重结构，导致光谱谱线的多重结构。多重线间隔与原子序数有关，轻元素谱线多重结构间隔很小。当使用极高分辨率的分光仪器（如干涉仪、大型光栅光谱仪高级次部分等）来观察原子光谱时，还可观察到原子光谱中各个多重线的每一条谱线。后者又可分裂成许多波长非常接近的谱线，出现超精细结构。它是由同位素效应和核自旋引起的。同位素效应较广泛地应用于光谱测定同位素各组分含量。

对于含有两个及两个以上的未耦电子体系，ESR 谱会表现出“零场分裂”和精细结构。所谓零场分裂就是在未加外磁场时，未耦电子间的相互作用使能级就已经产生分裂，正是这种分裂使得 ESR 谱中出现若干条谱线，被称之为精细结构，以示与电子和核相互作用引起的超精细结构的区别。

景深 depth of field 和物空间内场深相对应的最终像空间的距离叫做景深。在电子显微镜中，由于使用高放大倍数，景深都是非常大的，一般不必考虑景深问题。

警告限 alarm limit 在质量控制中预示被控制的产品特性量值有失控征兆的界限。在质控图中，用虚线表示在控制中心线的上、下两侧，作为产品特性量值的上、下警告限。位于控制中心线上侧的警告限，称为上警告限，位于控制中心线下侧的警告限，称为下警告限。通常以特性量值的标准差的 2 倍值作为警告限。这预期在正常的情况下，有 95% 特性量值落在警告限内，若实际情况像所预期的那样，表明生产过程处于统计控制状态。若有多于 5% 的特性量值落在警戒限之外，表明生产过程存在统计失控的危险。

径流柱 radial flow column 又称径向柱。由两个同心圆筒构成，能使

流动相带着样品沿柱的纵向移动的色谱柱。色谱填料装在圆筒的夹层中，圆筒的内外周边均固定有一层多孔滤膜，样品从圆筒的外周边加入，沿圆筒的径向流入中间的细管中，然后与检测器相连。径向柱进样面积大，等于圆筒外周边面积；柱长短，等于圆筒夹层厚度。

径向分布函数 radial distribution function；*RDF* 在均匀的和各向同性的非晶材料中，至中心原子的距离为 r 处的原子密度的统计平均值。*RDF* 可以通过散射实验求得，根据 *RDF* 可以确定中心原子到各个配位壳层的距离和各壳层的配位数。*RDF* 的特点是用一维的统计平均值表示出三维的原子空间分布，但在统计平均过程中，不可避免地抹掉了许多结构细节，不利于用 *RDF*（r）对物性进行解释。

径向流动色谱 radial flow chromatography 采用特制的径流柱，使样品在色谱柱上沿纵向移动而达到分离目的的一种色谱模式。其特点是进样面积较大可提高样品处理量，有利于制备；同时因其柱短，可使生物活性样品在很短的时间内通过色谱固定相，从而保证生物样品不失活，在生物制备领域具有较好的应用前景。

径向压缩柱 radial compression column 一种可在柱径向加压的制备型色谱柱。其结构是在一根长约30cm、内径5cm的塑料管内装上色谱填料，然后在其外层套上一根耐压不锈钢管，在塑料管和钢管的夹层内用水或压缩空气向柱管的径向施加压力，通过塑料管壁将填料压紧。

径向展开法 radial development 又称环形展开法。在圆形纸色谱法中，当点样后在展开槽中进行展开时，展开剂载带样品斑点的方式是自圆心向圆周，即色谱斑点沿径向分布，此种展开方式称为径向展开法。

径向展开色谱 radial development chromatography 又称径向流动色谱。参见**径向流动色谱**条。

净保留体积 net retention volume 经压力梯度校正因子 j 校正后的调整保留体积。用 V_N 表示，单位是 ml。其关系式为 $V_N = jV_R'$，式中，j 为色谱柱进口和出口压力梯度校正因子；V_R' 为调整保留体积。由于气相色谱中色谱柱内存在压力梯度，因此色谱柱内不同截面上的气体流速也不同，通常采用平均流速 F_c 来表示，F_c 和色谱柱出口流速 F_0 的关系为 $F_c = jF_0$。参见**压力梯度校正因子**条。

净法拉第电流 net Faradaic current 通过一个指示电极或工作电极的所有法拉第电流的代数和。

静电透镜 electrostatic lens 用静电场做成的电子透镜。静电场是一种轴对称或面对称的电场，对匀速带电粒子束的作用与玻璃透镜对光束的作用相似。轴对称静电场的作用与球面玻璃透镜的作用相似；面对称静电场的作用与柱面玻璃透镜的作用相似。应用于阴极射线示波管和电子显微镜中。

静态次级离子质谱 static secondary ion mass spectrometry 次级离子质谱法的一种。通过控制初级离子流密度和剂量，使在分析过程中，每一溅射剥离的量均非常少，使得离子束的溅射都发生在先前未经溅射区域所进行的次级离子质谱分析。由于溅射速率非常小，每次溅射均来自样品表面，通过质谱分析可以获得样品表面的成分。因为剥离速率很慢，近似静态不变，因此称为静态次级离子质谱。因为利用质谱检测，因此具有非常高的检测灵敏度，且仅检测来自表面单原子层的次级离子，具有很高的表面性。它使用的一次粒子的能量比动态二次离子质谱法较小，人射粒子的能量约为5keV以下，离子流密度约为$10^{-9}A\cdot cm^{-2}$，使样品表面受到的离子损伤范围小到可以忽视的程度。该方法主要用于样品最表面的成分分析及化合物的结构解析。

静态顶空分析法 static headspace analysis 顶空气相色谱分析中的一种静态进样方法。所谓静态顶空进样是指将被测样品放入密闭恒温的体系中，待气-液或气-固两相达到平衡时，抽取其与被测组分共存的蒸气相作为样品。静态顶空分析所用设备简单易实现，在取样时要求两相仍处于平衡状态，因此，在做定量分析时，每个顶空瓶只能取一次样，否则就会带入很大的误差。

静态二次离子质谱法 static secondary ion mass spectrometry 二次离子质谱法的一种。它使用的一次粒子的能量比动态二次离子质谱法较小，人射粒子的能量约为5keV以下，离子流密度约为$10^{-9}A\cdot cm^{-2}$，使样品表面受到的离子损伤范围小到可以忽视的程度。该方法主要用于样品最表面的成分分析及化合物的结构解析。

静态光散射 static light scattering 见弹性光散射条。

静态化学发光测量 static chemiluminescence measurement 利用静止池式的液相化学发光检测器对化学发光进行测量。这是一种研究较早的化学发光检测技术。与此相对应的是流动式化学发光测量，常用的有连续流动和流动注射式测量等。

静态涂渍法 static coating method 用于涂渍毛细管柱固定液的一种方法。根据分析要求（如柱长、固定液膜的厚度等）计算出所需固定液的量或浓度（$2\sim5g\cdot L^{-1}$），溶解固定液的溶剂一般选为二氯甲烷与正戊烷的混合液（1+1），在充液容量瓶中将固定液与溶剂混合均匀并进行脱气处理，利用压缩空气将固定液溶液压入毛细管柱，当柱充满后将柱出口端封闭，在水浴中（30~40℃）抽真空，达一定真空度后切去封口端，撤去真空将柱从水浴中取出。

镜面 mirror plane 进行反映对称操作的对称元素，又称对称面或反映面，国际符号为m。设在对称图形中有一个几何平面，对称图形中任意一点作为初始点向该几何平面作垂直线并向平面另一侧延伸等距离，此端点与初始点的性质完全相同。这个几何

平面就被称为镜面，上述对称操作就称为反映操作。

久期增宽 secular broadening ESR谱线的宽度有很大差别，这是因为除了寿命增宽外，还有久期增宽。ESR样品中不是只有一个小磁体（未偶电子、磁性核等），而是有许多的小磁体。每个小磁体除了处在外加磁场$\boldsymbol{H}$中外，还处在由其他小磁体所形成的"局部磁场"$\boldsymbol{H}'$中，所以真正的共振磁场为$\boldsymbol{H}_r=\boldsymbol{H}+\boldsymbol{H}'$。在ESR测量中，微波频率是固定的，因而共振磁场$\boldsymbol{H}_r$也是固定的，但局部磁场$\boldsymbol{H}'$有一定分布，因此引起磁共振的外加磁场$\boldsymbol{H}$不再是一个定值，而是在以$\boldsymbol{H}_r$为中心的某一个小范围内有一个分布，得到的谱线实际上是许多很窄谱线的包络。

居里磁化率 Curie magnetic susceptibility 又称静态磁化率（static magnetic susceptibility）。在外加静磁场$\boldsymbol{B}_0$作用下，当核自旋体系处于热平衡（温度T）状态时，体系的磁化强度矢量$\boldsymbol{M}_0$正比于$\boldsymbol{B}_0$：$\boldsymbol{M}_0=\chi_0\boldsymbol{B}_0$，$\chi_0=I(I+1)N\gamma^2\hbar^2/3kT$，比例常数$\chi_0$为居里磁化率。式中，$N$是单位体积内的核数目；$\gamma$和$I$是核的磁旋比和自旋量子数；$\hbar=\frac{h}{2\pi}$；$k$是波耳兹曼常数。

居里点 Curie point 顺磁性与铁磁性之间的转变温度。由于强磁性物质在居里点处要发生表观重量变化，因此可利用强磁性物质来标定热重分析仪的温度，所选用的强磁性材料如镍铝合金（155℃）、镍（355℃）、派克合金（599℃）和铁（788℃）等。

居里点裂解器 Curie point pyrolyzer 居里点裂解器是裂解色谱常用的一种裂解器，它的加热元件是由铁磁性物质制成丝状、片状或管状，样品负载到置于高频电场中的加热元件上，由于铁磁性材料吸收射频能量，加热元件迅速升温，当到达铁磁-顺磁转变点（居里点）时，温度达到平衡并在较小的范围内保持稳定，样品在居里点温度下裂解，裂解后的小分子碎片引入色谱柱进行分离、分析。加热元件的几何形状和高频振荡器的功率对居里点裂解器温度的重视性和精度有直接的影响，实验条件必须严格控制。

局部控制 local control 一种将不同因素水平的试验安排在同一区组内以提高试验精度的试验设计原则。它是费歇尔提出的试验设计应遵循的三个基本原则之一。按照某一标准将试验对象加以分组，所分的组称为区组。在区组内试验条件相对比较接近、相似和一致，区组之间的差异相对较大，将同一因素不同水平的试验安排在同一区组内，试验误差较小，有利于灵敏地判断因素效应。

局部优化 local optimization 在优化过程中，只是在优化空间的某一子空间而不是在全空间达到最优条件和获得最优值。

菊池线 Kikuchi line 在单晶体的电子衍射花样中除了斑点以外的复杂

的线状花纹。菊池线由花样的漫散背景中的结构组成，其起源同弹性散射和非弹性散射都有关系。因其几何特征由菊池（Kikuchi）最初提出的最简化的机制来推断而得名。是由经过非弹性碰撞能量损失很小的电子在而后的弹性散射中所产生的。

矩形池　rectangle form pool　用矩形扁毛细管做毛细管电泳分离的紫外在柱检测，增加检测光程，从而提高毛细管柱上检测的灵敏度。扁形毛细管制作工艺复杂。

拒绝域　reject region　又称否定域。在统计检验中原假设 H_0 为真时正确拒绝原假设 H_0 的概率区间。若约定的显著性水平为 α，在分析测试中，通常取 $\alpha = 0.05$，是一个小概率，即原假设 H_0 正确而拒绝接受它的概率是一个小概率事件，是不易发生的。$(1-\alpha)$ 是原假设 H_0 为真时正确接受它的概率。参见**接受域**条。

具有固定演化时间的 X 核相关实验　X-nucleus correlation with fixed evolution time; XCORFE　是改良的 COLOC 实验。它反映 ^1H 核与其他核，主要是 ^{13}C 核的化学位移之间的关系，并且能将 $^1J_{CH}$ 中分辨出 $^2J_{CH}$ 和 $^3J_{CH}$ 的长程耦合关系。

聚苯乙烯　PS/DVB　苯乙烯和二乙烯基苯聚合所得的共聚物。当 DVB 加入到苯乙烯中，DVB 的两个乙烯功能基就与苯乙烯链相互交联，聚合后的共聚物是具有三维网络结构的疏水性化学惰性的球形颗粒。是离子色谱中最常用的离子交换树脂，通常以其为基质，通过表面改性（修饰）或接入不同功能分子制备出各种用途的聚合物基质色谱填料。

聚苯乙烯-二乙烯苯树脂　polystyrene-divinylbenzene resin　通过苯乙烯与二乙烯苯的单体经共聚合反应合成。由于二乙烯苯的加入，致使长链的聚苯乙烯构成了立体网状结构。二乙烯苯又称为交联剂，它在树脂内的百分含量称为交联度。树脂交联度的大小会直接影响到基体网状结构的紧密程度和孔径大小，从而影响树脂的分离选择性，并且与交换树脂的物理化学性质也有密切的关系。

聚苯乙烯分子量标准　standard molecular weight of polystyrene　以标定凝胶色谱的已知分子量的聚苯乙烯作为标准样品，用于凝胶色谱分离后各组分分子量及其分布的标定，这种标准聚苯乙烯的分子量称为聚苯乙烯分子量标准。以凝胶色谱分离测定高分子的分子量及其分布时，在一定范围内分子量的对数与色谱保留时间成线性关系。利用这种性质，选取窄分布的不同平均分子量的聚苯乙烯作为分子量标准，在选定的凝胶色谱柱上分离，求得保留时间对分子量对数的标准曲线，继而可对不同高分子样品色谱组分的分子量及分布进行测定。

聚丙烯酰胺　polyacrylamide　是具有丙烯酰胺单体头尾键合结构的聚合物，在常温下为坚硬的玻璃态固体。具有良好的热稳定性，溶于水，水溶液呈清澈透明状，其黏度随聚合物分子量的增加明显增加。除乙酸、丙烯

酸、乙二醇、甘油等少数溶剂外，一般不溶于有机溶剂。由丙烯酰胺单体自由基聚合而成，可采用溶液聚合、反相乳液聚合、悬浮聚合和固态聚合几种方法。它可广泛用于造纸、采矿、洗煤、冶金、石油开采等工业部门，是水处理的重要化学品。

聚光镜 focus lens 电镜中增强电子束密度和会聚发散电子的装置。电子之间由于库仑排斥力和阳极小孔的发散作用，电子束通过阳极小孔后，又逐渐变粗，射到试样上仍然过大。聚光镜就是为了克服这种缺陷而加入的。它能使射到试样上的电子束截面变小，使电子束直径、强度和电子动能满足显微镜的要求。

聚硅氧烷高温裂解去活 high-temperature pyrolysis deactivation with polysiloxane 亦称聚硅氧烷降解法（PSD），一种适用于玻璃毛细管柱去活的方法。用动态法把聚硅氧烷固定液（如 OV-101）涂渍在毛细管柱中，把柱两端封口后在高达 450℃ 的温度下加热 2 ~ 20h，在加热过程中聚硅氧烷受热部分分解，一些分解产物与毛细管柱表面的硅醇基反应以达到去活的目的，未分解的聚硅氧烷用溶剂洗去。由于这种方法处理温度太高，会使弹性毛细管柱的聚酰亚胺外涂层遭到破坏，因此可采用含氢硅油裂解去活法，其处理温度为 250℃。

聚合酶链式反应 polymerase chain reaction; PCR 一种在体外模拟自然 DNA 复制过程的核酸技术，即无细胞分子克隆技术。它以待扩增的 DNA 片段为模板，由一对人工合成的寡核苷酸引物介导，通过 DNA 聚合酶链式反应快速体外扩增特异 DNA 序列。由于 PCR 技术经过变性，复性和延伸约 30 个循环就可在 2h 内将靶 DNA 扩增数百万倍，并具有操作简单、快速、特异和灵敏的特点，目前已被广泛用于微生物及其他领域的快速诊断、检测和鉴定等技术。PCR 技术也称 DNA 扩增技术。

聚合物基质离子交换剂 polymer substrate ion exchanger 在聚苯乙烯等有机聚合物基质表面键合或包覆上各种离子交换基团后得到的离子交换剂。此类离子交换剂使用 pH 范围宽，但溶胀性较大、不耐高压、基质表面和内部的微孔会影响溶质传递速率。

聚甲基丙烯酸甲酯 polymethyl methacrylate 俗称有机玻璃。为高度透明的无定型热塑性材料，耐热性好，坚硬，可制成片状、粒状、溶液、乳液。不溶于水、甲醇、甘油，溶于芳烃、氯代烃、酮类等有机溶剂。制法有本体聚合、悬浮聚合、乳液聚合、溶液聚合等。工业上主要采用本体聚合和悬浮聚合，即将一定配比的甲基丙烯酸甲酯等单体和增塑剂，在特定的硅玻璃或金属模型内进行本体聚合而得。它广泛用于窗玻璃、光学仪器、照明、医用药材、装饰品等。

聚类分析 cluster analysis 在事先不知道样本类别信息的情况下，依据样本数据内在的相似性规律（如特

征空间中相似性距离）将样本进行分类的方法。聚类分析是一种无监督分类方法，是多元统计分析的三大方法之一。包括系统聚类法、分解聚类法、加入聚类法、动态聚类法和模糊聚类法等。它不仅能将所考察的样本合理地进行分类，还可以预测样本的某些规律。在中草药分类、追踪污染源、真伪商品识别、癌症早期诊断等方面都有广泛的应用。

聚酰胺薄层板　polyamide thin-layer plate　采用聚酰胺作为吸附剂制成的薄层分离板。因其分子内存在很多酰胺基，可与酚类、酸类、醌类、硝基化合物等形成氢键，从而产生吸附作用。它的特殊的色谱分辨能力已被广泛地应用于合成燃料、维生素、抗菌素等化学结构分析中。例如尼龙 6，即己内酰胺的聚合物，由于其酰胺键的羰基能和酸类及酚类形成氢键，酰胺键的氨基能和硝基化合物及醌类化合物形成氢键而具有特异的色谱分辨性能。

聚乙烯粉末压片法　polyethylene powder disk technique　有些固体样品含有极性基团或金属离子，采用碘化铯压片法制样可能会使谱带变形或发生离子交换，此时可采用聚乙烯粉末压片法。因固体样品和聚乙烯粉末在玛瑙研钵中研磨时容易产生静电，造成聚乙烯粉末和样品飞扬，需先将待测固体样品放入玛瑙研钵中研磨，然后放入适量聚乙烯粉末，用小的不锈钢扁铲把研磨好的样品和聚乙烯粉末充分混合。这样混合好的样品不带静电，很容易转移到模具中压片。聚乙烯粉末有韧性，不容易研磨碎，难以压出透明的薄片，造成光谱基线的倾斜，为此需将聚乙烯粉末研磨到 $<20\mu m$以下，或采用基线校正以便改善谱图的质量。

卷积伏安法　convolution voltammetry　半积分和半微分电分析法的统称，是记录半积分电流或半微分电流与电压的关系曲线为基础的方法。已应用于多种极谱技术，如线性扫描伏安法、循环伏安法、阶梯波极谱法、方波极谱法和阳极溶出伏安法等。这种方法灵敏度高，分辨率好；仪器结构简单，操作方便；记录速度快，尤其适用于快速分析和快速电极反应的研究；支持电解质浓度很低，甚至不存在电解质的情况下也能顺利地测定；所得曲线多为对称峰形，且与外加电压的性质无关。这对于 A-D（模-数）和 D-A（数-模）转换是很方便的，有利于计算机（或微处理机）控制操作过程和处理结果。该方法不仅用于分析测定，也用于电极过程的研究，测定电极反应速率常数、络合物的稳定常数等。

卷积光谱法　convolution spectrum method　又称褶合光谱法。是在 Glenn 正交函数法的基础上，采用类似多项式回归的褶合变换技术而发展来的一种信号分析方法。在这种方法中，将物质对光吸收特性的变化，以数学分量的形式分离提取出来，并记录各数学分量随平均波长变化的轨迹，构成一种由成百上千条褶合曲线

组合起来的新的独立的光谱体系——褶合光谱群。褶合曲线上的每一个值，都与一段波长区间内物质的吸光特性相对应。褶合变换对应原始吸收光谱进行以正交多项式为基础的正交变换和正交分解，得到该吸收光谱中各种基所占的比例，即得到构成原始吸收光谱的主成分的权作为新的变量。主成分之间相互正交，且能显示出原始光谱在构成上的局部细节特征，从而为化学结构相似物质紫外吸收光谱的定性鉴别提出新的手段；由新变量构成的褶合光谱表现出来的异样性减少了组分间的相关性，使定量分析可得到更为准确的结果。目前已有褶合光谱仪研制成功，并被用于药物复杂体系的分析。

绝对法（活化分析） absolute method (of activation analysis) 直接通过测量生成核的绝对放射性活度、照射粒子通量，根据活化方程计算试样中被测元素含量的一种活化分析方法。靶核经 t 时间辐照和 t' 时间衰变后的放射性强度为

$$A_{t'} = 6.023 \times 10^{23} f\sigma \frac{W}{M} \times (1 - e^{-0.693t/T\frac{1}{2}}) e^{-0.693t'/T\frac{1}{2}}$$

测量了 t' 时刻的放射性活度 $A_{t'}$。根据粒子通量 f、核反应截面 σ、半衰期 $T_{1/2}$ 等核常数和被测靶元素的原子量 M，可以直接计算出被测元素的含量 W。从本质上讲，活化分析是一种绝对分析方法，但由于 $A_{t'}$ 绝对测量比较麻烦，f 和 σ 不易准确测定，在实际的活化分析工作中很少采用绝对法，绝大多数情况下都采用相对法。参见**活化方程式**条和**相对法活化分析**条。

绝对构型 absolute configuration 手性晶体或分子中各个基团或原子在空间的真实排列关系，即绝对的空间关系。当晶体或分子按规定所表达的立体结构，与该晶体或分子真实的立体结构一致时，这种立体结构的构型即为绝对构型。为了规定立体结构的方向性，早期以甘油醛为标准，用 D 和 L 分别表示两种不同的手性结构。目前主要采用国际纯粹化学和应用化学联合会推荐的、根据次序规则表示绝对构型的 R 和 S 体系。

绝对检测器 absolute detector 能直接确定被测组分含量的检测器。例如体积色谱法中的检测装置，通过有刻度量气管测出的每个组分的体积即可直接决定组分的百分含量。

绝对偏差 absolute deviation 简称偏差。是单次测量值与测量平均值之差。绝对偏差与偏差绝对值是两个不同的概念，偏差具有相互抵偿的特性，当进行足够多次测定时，由于单次测量值出现的随机性，比平均值偏大或偏小的测量值出现的概率相等，偏差有正有负，其平均值为零；偏差绝对值是指偏差的绝对值，不计它的正、负号，多次测量的偏差绝对值不为零，而具有加和性。

绝对误差 absolute error 简称误差。是测量值与真值之差，表征测定结果的准确度。对于给定的目的来说，通常以国际上公认的约定真值

（如标准原子量值）和相对真值（如国家标准物质证书上给出的保证值）当作真值使用，以衡量某一分析方法和测量结果的准确度。误差分为绝对误差和相对误差

$$绝对误差=测定值-真值$$

$$相对误差=\frac{测定值-真值}{真值}$$

绝热快通过 adiabatic fast passage 用连续波方式进行 NMR 实验时，若扫场或扫频通过各共振核时满足所谓绝热快通过条件：

$$\frac{1}{T_1}或\frac{1}{T_2}\ll\left(\frac{1}{B_1}\right)\frac{dB}{dt}\ll|\gamma B_l|$$

它意味着扫描速度远远大于弛豫速度，射频场 B_1 扫到某核共振点时，该核的磁化强度 M 离开平衡位置 M_0、B_1 很快扫过共振点。但 M 来不及恢复，绕 B 以角频率 γB 继续进动，直到 M 的横向磁化强度完全失相为止。进动保持的时间是 T_2 数量级，因此可接收到一个衰减的射频振荡信号，称为尾波。这种扫描为绝热快通过，观测尾波的形状经常是调试谱仪磁场均匀度的重要参考，磁场均匀度高时尾波幅度大，衰减慢，尾长；磁场均匀度差时尾波幅度小，衰减快，尾短。

均相沉淀法 precipitation from homogeneous solution 又称均匀沉淀法。在均相溶液中，借助于适当的化学反应，有控制地、缓慢地产生为沉淀作用所需的离子，使在整个溶液中缓慢地析出颗粒较大的晶形沉淀或密实的无定形沉淀的过程。它不仅能改善沉淀的性质和沉淀分离的效率，而且是研究沉淀和共沉淀过程有效的工具。可通过如下手段实现均相沉淀法：（1）控制溶液 pH；（2）酯类或其他化合物水解产生沉淀离子；（3）络合物解离释放待沉淀离子；（4）氧化还原反应产生所需沉淀离子；（5）合成-螯合物沉淀法，例如借助亚硝酸钠与 β-萘酚反应合成 α-亚硝基-β-萘酚均相沉淀钴离子；（6）借酶化学反应。

均相成核作用 homogeneous nucleation 沉淀的形成大致可分为晶核的形成和晶核的成长两个阶段。晶核的形成有两种情况：均相成核作用和异相成核作用。均相成核作用是指构晶粒子在过饱和溶液中通过离子的缔合作用，自发地形成晶核的过程；而异相成核作用是指因溶液中混有固体微粒（灰尘、试剂中的不溶性颗粒等），或因玻璃容器壁的玻璃核等诱发晶核形成的过程。

均相萃取 homogeneous extraction 一种特殊的萃取方法。一些有机溶剂在室温下与水不相混溶，但在较高温度下成为混溶，这种性质可用于萃取。例如，将含有 Fe(Ⅲ)的水溶液和 TTA（噻吩甲酰三氟丙酮）的丙烯酸酯溶液混合，在 80℃下形成均相溶液，该温度下 Fe(Ⅲ)很快地与 TTA 形成络合物，溶液冷却后离心分离可得两个单独液层，Fe(Ⅲ)-TTA 络合物萃入有机相中而实现分离。

均相化学反应 homogeneous chemical reaction 电极反应的反应物或产

物在均匀的单相中（溶液相或电极相）发生化学反应。

均相火焰化学发光 homogeneous phase flame chemiluminescence 利用火焰使样品挥发，并在火焰中产生的化学发光。火焰中产生的化学发光反应主要来自于火焰中产生的分子或原子碎片之间的反应。一般认为，在用于气相物质的检测时，火焰化学发光受到一定限制。其主要应用在于硫、磷化合物的检测。

均匀试验设计 homogeneous design of experiment 用规格化的均匀设计表安排试验。均匀试验设计表是我国数学家方开泰应用数论方法构造出来的。均匀试验设计最突出的优点是实验点均衡地分布在整个试验区内，试验工作量比正交试验设计少的多。可用回归分析法处理均匀设计的试验数据，它是一种高效试验优化方法，在分析试验设计中有广泛的应用。

均匀性破坏脉冲 homogeneity spoil pulse 在探测脉冲到来之前被测体系的横向磁化必须为零，横向弛豫时间 T_2 长的核要等待很长时间方能恢复，为了节省实验时间，一个有效的实验方法是在采集 FID 信号之后施加一个脉冲，使静磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 的均匀度在瞬时内受到破坏，称为均匀性破坏脉冲。它使残余的横向磁化强度瞬间失相而为零。为恢复磁场的均匀度，在均匀性破坏脉冲之后需要有 100ms 的等待恢复时间。

均匀增宽 homogeneous broadening ESR 谱线可以分为均匀增宽和非均匀增宽两类。在均匀增宽的情况下，所有自旋都具有同样的环境。或者说，均匀增宽是指在各个自旋处，稳定磁场（即直流磁场）与时间平均磁场之间可以认为是相等的，但与瞬时磁场却有所不同。这表明每个自旋的线型及共振位置（即以磁场为函数的跃迁几率）均相同。它们合成的波包线型是洛伦兹型。

K

卡尔·费休滴定法 Karl Fischer titration method 1935 年 Karl Fischer 在研究 SO_2 中水分测定时发明的、属非水滴定中的一种氧化还原滴定法。滴定中使用的卡尔·费休试剂由碘、二氧化硫、吡啶和甲醇配制而成，滴定终点可用肉眼（由橙黄色变为琥珀色，不太明显）或电化学方法（死停点法）判定。它是目前公认的快速而准确测定物质中或反应产生或消耗的水分的方法。其总反应式：$I_2 + SO_2 + H_2O + CH_3OH + 3Py \rightarrow 2PyH^+I^- + PyHOSO_2OCH_3$，式中 Py 代表 C_5H_5N（吡啶）。

卡尔曼滤波分光光度法 Kalman filter spectrophotometry 采用卡尔曼滤波技术处理分光光度测量数据的一种方法。卡尔曼滤波是一种递推形式的计算方法，它对复杂体系的吸光度数据进行递推计算，逐步修正计算结果，当计算的浓度结果趋于收敛时，停止计算。由于它是一种递推式的计算方法，并不要求同时采用全波谱或全时域的测量数据，因此特别适用于实时分析和在线分析。但卡尔曼滤波方法要求预知各个干扰组分的纯波谱，且各组分间的吸光度应基本符合加合性质。卡尔曼滤波方法在分析化学中应用很广，目前已有适应卡尔曼滤波（adaptive Kalman filter）、广泛应用于电分析化学极谱及伏安法分析。

开口分流 open split 开口管柱（OTC）与质谱的一种接口技术。与质谱仪相连接的毛细管的直径限定了进入离子源的气体流速。进入质谱仪流分的分量取决于 GC 柱载气的流速及冲洗气的流速。增加冲洗气的流速可吹扫除去大部分或其他不希望进入质谱仪的流分。开口分流使 OTC 出口处在大气压下，也便于更换 GC 柱而毋需将质谱仪真空放空至大气压。

开口管柱 open tubular column 又称毛细管柱、空心毛细管柱、戈雷柱。是气相色谱两大柱型中的一种。开口管柱按内壁处理方法不同又分为两种类型，一类是将固定液均匀地涂渍在内径为 0.1～0.5mm 的毛细管柱内壁，称为涂壁毛细管柱（参见**涂壁毛细管柱**条）。另一类是将多孔性物质沉积在毛细管柱的内壁，称为多孔层开口管柱（参见**多孔层开口管柱**条）。

开路电位 open circuit potential 无负荷状态下的端电压，是正极和负极电位的代数和。

凯氏定氮法 Kieldahl's method 全氮分析中应用最普遍的一种方法。自 1883 年 Kieldahl 提出本法后，已有了许多改进，用于有机氮和铵态氮的含量测定，硝基氮需先还原成铵态氮之后才能测定。样品与浓硫酸和催化剂一同加热消化，使蛋白质分解，其中碳和氢被氧化成二氧化碳和水逸出，而样品中的有机氮转化为氨，与浓硫酸结合生成硫酸铵。然后加碱蒸馏将

氮蒸出，硼酸吸收后用标准盐酸或硫酸溶液滴定，根据标准酸消耗量可计算出总氮的含量。一般蛋白质含氮量约为16%，即1份氮素相当于6.25(亦称蛋白质系数)份蛋白质，不同来源蛋白质的蛋白质系数不同，如玉米、荞麦、青豆、鸡蛋均为6.25；花生为5.46；大米为5.95；大豆及制品为5.71；小麦为5.70；高粱为5.83；牛乳及制品为6.38，由此可换算出蛋白质的含量。由于此方法测得总氮的含量中包括游离氨基酸、酰胺、生物碱等非蛋白氮，用此法测定的蛋白也称"粗蛋白"。凯氏法分为常量法、半微量法和定氮仪法等。

看谱法 spectrometry 看谱法以眼睛为检测器，以看谱镜(spectroscope)或看谱计作为分光系统。看谱法不需复杂的检测系统，仪器结构简单，检测速度较快，检测的光流量与时间无关。但由于眼镜观察的光谱区窄，测定元素少，能估计的含量范围窄，分析准确度较差，又不能将谱线永久保存，因此应用受到限制。仅在炉前分析和金属分类分析中有所应用。

看谱镜 spectroscope 仅有目镜装置的看谱仪器称为看谱镜，装有光度计的看谱仪器称为看谱计。看谱镜不能比较谱线的强度，只能用于定性分析；看谱计能够比较谱线的强度，可以进行半定量和定量分析。看谱镜或看谱计常以玻璃棱镜或光栅为色散元件，并按自准式光学系统的方式组装，以便将可见光谱区的不同波段引入视场。它们与摄谱仪或光电直读光谱仪的不同之处，是在仪器的谱面上安置目镜或光度计。看谱镜的显微系统是为了观察光谱而设置的。看谱镜也可附加一个用调压变压器调节的连续光源，以便改变叠加在线状光谱中的连续光谱强度。根据分析线在连续光谱中刚消失时的灯电压，可以确定其相对强度，进行半定量或定量分析。

抗磁屏蔽 diamagnetic shielding 核外电子若处于球对称分布时，它的轨道角动量和自旋角动量都为零，此时原子处于^1S态，当它处于外磁场$\boldsymbol{B}_0$中，所有电子都绕外磁场方向作进动，并诱导出一个次级磁场$\boldsymbol{B}'$

$$\boldsymbol{B}' = -\sigma \boldsymbol{B}_0$$

$$\sigma = 4\pi e^2 \int_0^\infty \frac{r\rho(r)\mathrm{d}r}{3mc^2} \quad \text{(Lamb 公式)}$$

式中，σ为屏蔽常数；r是电子离核距离；$\rho(r)$为电子云密度；c为光速。由于这诱导磁场总是与外加磁场方向相反，起着削弱外磁场的作用，因此称为抗磁屏蔽。抗磁屏蔽常数常记以σ_d。核外的这种电子云密度愈大，抗磁贡献也就愈大，即对核的屏蔽效应愈大，使核的NMR移向高场或低频方向。多数有机化合物及基态化合物在$\boldsymbol{B}_0$中呈抗磁屏蔽。

抗磁性 diamagnetism 介质在外磁场中，磁化方向与外磁场方向相反，介质中的磁感应强度比真空中的磁场强度小，则称这种介质具有抗磁性。抗磁性是弱磁性的一种，一般磁化很弱，除去磁场后消失。具有闭合壳层电子结构的分子，因所有电子壳层都充满，电子皆配对，电子轨道磁矩与自旋磁

矩皆为零,电子总磁矩也为零,本身无磁性。当受到外磁场作用下,分子内部电子云被极化产生感应电流,所形成的磁矩与外磁场相反,从而该分子呈现抗磁性,这种物质因此称为抗磁性物质。绝大多数有机化合物,许多基态化合物属于抗磁性物质。抗磁性物质的磁化率χ为负值,抗磁性磁化率几乎与温度无关。

抗酸染色法 acid-fast stain 一种常用于结核分枝杆菌及麻风杆菌及其他抗酸性细菌的染色方法。此法是用5%石炭酸复红加温染色,再用美蓝复染。抗酸性细菌不被盐酸酒精脱色而保持红色为阳性;非抗酸性细菌复染成蓝色。

抗体 antibody 指对原刺激发生反应所产生的蛋白质,与相对应的抗原有特异性反应,它们由浆细胞(从B细胞分化而来)合成。抗体与抗原只在其分子表面特定部位发生结合。抗体可产生体液免疫和细胞免疫。抗体是免疫球蛋白,有5种主要的结构类型,多数抗体由两个相同的重链和两个相同的轻链通过二硫键相连组成。

抗体半衰期 antibody half-life 抗体分子因代谢而减少到原量的一半所需要的时间,即测定一定剂量的抗体从动物体内排除一半所需的时间。

抗体吸收试验 antibody absorption test 一种血清学试验。在甲血清被乙血清吸收前后,测定其对甲抗原的抗体滴度。由此测出交叉反应抗体和交叉反应抗原。

抗血清 antiserum 多数是先给动物注射抗原,在充分产生抗体后再进行采血,经过除去血细胞和纤维蛋白后再进行适当处理,然后保存备用,可用于实验或治疗(血清疗法)。为了明确抗原的种类和动物的种类,可把牛血清作为抗原对家兔进行免疫所得到的抗体血清,命名为"抗牛血清家兔抗体血清"。

抗氧化剂 antioxidants 能防止或延缓食品成分氧化变质的食品添加剂。按溶解性它分为油溶性和水溶性两类,油溶性的有丁基氨基茴香醚(BHA)、二丁基羟基甲苯(BHT)、叔丁基对苯二酚(TBHQ)、没食子酸丙酯(PG)等,水溶性的有异抗坏血酸及其盐类。按来源可分为天然的和人工合成的两类,天然的有DL-α-硝酚、茶多酚等,人工合成的有丁基羟基茴香醚等。

抗原结合片段 fragment antigen binding;Fab 免疫球蛋白的水解片段。应用木瓜蛋白酶(papain)水解IgG,可将其重链与链间二硫键近氨基端处切断,得到三个片段,包括两个相同的Fab段,和一个Fc段,即可结晶片段(crystallizable fragment)。每一Fab段含有一条完整的轻链和部分的重链(Fd段),Fab段是具有抗体活性的部分,其结合抗原的部位在该段VL及VH功能区的高变区。Fc段容易结晶,由两条重链C端的一半组成,包含CH_2、CH_3。它不能与抗原结合,但具有各类Ig的抗原决定簇及Ig的其他生物学活性,Ig所含的糖类亦在Fc段。

抗原决定簇 antigenic determinant; AD 存在于抗原分子表面、决定抗原特殊性的化学集团。抗原决定簇一般由5～8个氨基酸残基、葡萄糖残基或核苷酸残基组成。一个抗原通常具有多种不同的抗原决定簇。位于抗原分子表面易被相应的淋巴细胞识别、启动免疫应答，同时能与相应抗体或致敏T细胞特异性结合发生免疫反应的抗原决定簇，称为功能性（抗原）决定簇。位于抗原分子内部，不能被淋巴细胞识别，无法触发免疫应答的抗原决定簇，称为隐蔽性（抗原）决定簇。若经理化因素处理或经抗原呈递细胞加工后，这种隐蔽性抗原分子内部的决定簇有可能充分暴露，而成为功能性（抗原）决定簇发挥免疫作用。

抗原抗体反应 antigen antibody reaction 抗原与对应抗体的特异性结合形成可逆性的抗原抗体复合物的过程。抗原抗体的溶解度取决于抗原抗体的比率。抗原抗体反应在一定条件下可出现沉淀反应、凝集反应、补体结合反应、中和反应或嗜酸细胞效应等，这对于研究免疫物质特性和应用于临床的诊断颇为重要。抗原抗体反应的基础是抗体的结合部位与抗原决定簇之间的反应。

柯尔纽棱镜 Cornu prism 在紫外区、红外区工作的许多棱镜摄谱仪、棱镜分光光度计常常要用到石英晶体色散棱镜。因为石英晶体不但是光学各向异性的晶体，而且还具有旋光性，所以制作石英晶体棱镜时不但要使晶体光轴平行于棱镜底边切割研磨，而且要分别用左旋和右旋两种石英晶体分别制作一个半棱镜，然后再将这两个半棱镜的长直角面用光学接触（光胶）方法胶合成一个完整的色散棱镜，这种棱镜称为柯尔纽棱镜。光束通过柯尔纽棱镜色散时，光束经过左、右旋石英晶体时不同旋向的旋光性影响正好互相抵消，最后获得不会分裂的单一谱线。

颗粒物采样 particular sampling 分为固定污染源和流动源颗粒物的采样。固定污染源颗粒物的采样，不仅涉及固态颗粒物采样，同时也涉及到诸如硫酸雾等液态颗粒物的采样。为了取得有代表性的样品，必须遵循等速采样原则，即保持含颗粒物气流进入采样嘴的速度同排放管道内该点气流速度相等。流动源颗粒物采样包括两类，一是采集燃煤蒸汽机排放的颗粒物，另一类是测量柴油机排气烟度采集炭烟烟炱。前者的采样与固定源颗粒物采样原则上相同；炭烟烟炱的采样是利用一种采样装置，从柴油机排气管中抽出一定容量的排气，使之通过一张滤纸，废气中的烟炭存留在滤纸上，将滤纸染黑，用检测装置测定滤纸的染黑度，即代表柴油机的排气烟度。烟度是指一定容量排气所透过的滤纸的染黑度。常用的采样方法有无动力集尘罐法、大流量、中流量和小流量采样器法等。

颗粒物的粒径分布测定 particle size distribution determination 颗粒物粒度分布是表征颗粒物粒径大小分布的参数。一般大气飘尘的粒度小于

10μm,降尘的粒度大于10μm。不同粒度颗粒物的物理性质(如光学的、电磁学的等)和化学成分有很大的不同,因此,颗粒物的特性随其粒度的不同而不同,需要对颗粒物的粒度分布进行测定。根据大气颗粒物粒度的分布可判别其污染的来源和对人体健康的危害。采集大气中不同粒度的颗粒物,可用大气颗粒物分级采样器。现在使用较多的有安德逊(Anderson)分级采样器(分9种粒度收集)和大容量分级采样器(分5种粒度收集)。

可拆卸空心阴极灯 demountable hollow cathode lamp 一种可以拆卸和更换空心阴极的空心阴极光源。优点是一灯多用,只用于某些研究工作。因操作复杂,且需要高真空技术的经验,使用不便,在商品仪器中没有得到推广。

可拆卸X射线管 demountable X-ray tube 管身可以拆卸,依靠连续抽气保证管内高真空度的X射线管。这种X射线管的优点是:烧坏的灯丝易于更换,便于清理靶材表面的玷污,可以根据需要更换靶材,允许使用极薄或敞开的窗口,适用于轻元素的分析等。缺点是:需要连续抽气保持高真空,输出的X射线强度不易稳定等。以待测样品作为靶材,即构成经典的原级X射线荧光光谱仪。

可萃取酸 extractable acids 从某些制剂中可萃取的总有机酸。在某些场合,需把盐、胺、酯等转化为母体酸之后测定。例如,农药2,4,5-涕溶于三乙醇胺溶液中,用盐酸酸化使释放出有机酸,以乙醚萃取沉淀出的有机酸,蒸去乙醚,残留物溶于中性乙醇中,以酚酞作为指示剂,用氢氧化钠滴定。

可的松口服葡萄糖耐量实验 cortisone-oral glucosetolerance test 在应激的同时给予糖负荷,通过加强机体对胰岛素分泌的要求来提高耐糖试验的敏感性,以观察机体有无潜在的耐糖缺陷。本试验一般采用在第一次口服葡萄糖耐量试验(OGTT)后,给病人口服50mg醋酸可的松,6h后再服一次,两小时后进行第二次OGTT,然后分析耐糖曲线。

可忽视残留 negligible residue 在毒物学上认为不致引起危害的,可忽略不计的农药残留量。

可见光检测器 visible light detector 又称分光光度检测器。是基于溶质分子吸收可见光的原理设计的检测器。能够直接采用可见光检测的溶质不是很多,而且多数灵敏度也不高,但采用具有高摩尔吸光系数的有机试剂(配位体和螯合剂)作为衍生化试剂进行柱前或柱后衍生操作的衍生化光度检测法是相当有用的,特别是在金属离子配合物液相色谱中的应用是相当成功的。

可交换离子 exchangeable ion 离子交换剂在与流动相接触时,能从离子交换剂功能基团上离解出来,与周围的带同种电荷的其他离子相互交换的离子。人们通过控制离子交换剂上的可交换离子、创造合适的条件,如改变淋洗剂的种类和浓度,使样品离

了达到最佳分离。

可靠性 reliability 计量器具在规定条件下和规定时间内，完成规定功能的能力。是达到量值准确可靠的重要保证。对于化学测定而言，保证测量仪器性能正常只是获得可靠测定结果的必要条件之一，测量结果可靠性的大小还受到测量方法、测量条件和测量过程中许多因素的影响，还必须正确地选择测量方法，优化测量条件，严格地控制各种因素的影响，才能获得可靠的测量结果。

可靠性因子 reliability index 晶体结构测定中，衡量测得的晶体结构模型与实际结构吻合程度的一个重要指标，又称一致性因子，R 因子。R 因子的定义为

$$R=\frac{\sum\left|\,|F_o|-|F_c|\,\right|}{\sum|F_o|}$$

或

$$R_w=\frac{\sum w\left|\,|F_o|-|F_c|\,\right|}{\sum w|F_o|}$$

式中，$|F_o|$ 和 $|F_c|$ 分别是实测结构振幅和计算结构振幅；w 是权重。在晶体结构的最小二乘修正程序的输出文件中都会给出 R 因子。显然，当结构模型正确，实验数据无误差时，R 因子应该为零。在实际工作中，当 $R<0.1$ 时，一般认为结构模型是正确的；当 $R<0.05$ 时，认为模型与实际晶体结构吻合得很好。

可控因素 controlled factor 又称可控变量。是其水平可以人为地加以调控的、直接影响试验指标而欲考察的因素。通过实验，可确定其最佳水平。在分析测试中，影响分析结果的酸度、试剂浓度、温度等都是可控因素，它们的水平在实验中都可以根据需要加以改变。

可逆电池 reversible cell 凡能以热力学可逆过程进行放电和充电的电池统称为可逆电池。可逆电池必须满足的条件是：（1）电池反应必须是可逆的；（2）电池能量的变化也必须是可逆的；（3）无论充电或放电，都应在无限接近平衡状态下进行。因此可逆电池能严格地用热力学进行处理，故是研究实际电池的重要参考。另外，测定可逆电池的电动势对计算溶液中的离子活度，离子的平均活度系数，电池反应的热力学参数等，都有重要的实际意义。

可逆极谱波 reversible polarography 又称扩散波。是电极反应可逆，极谱电流仅受扩散速率控制的极谱波。

可调谐激光光源 tunable laser source 以固体（半导体）、液体或高压（数兆帕大气压）气体作为激活介质，这时一般不再出锐线光谱，而是比较宽的、真正连续或准连续的吸收和发射区，这样的一种激光光源被称为可调谐激光光源。因此，增益线型覆盖一个比较大的波长范围，在这个范围的界限内，原则上能发生激光振荡。用波长选择元件如棱镜、反射光栅、干涉仪等能使这个范围变窄。可调谐激光光源这种波长可以调谐的特性对激光光谱学和激光光谱分析法是十分重要的。

可调谐激光器 adjusting frequency laser 其输出波长可以在某个较宽的波长范围内连续可调的激光光源。利用过渡金属离子振动带的可调谐的固体激光器，就是重要的可调谐激光器之一，例如在 Cr^{3+}：$BeAl_2O_4$ 激光器中，Cr^{3+} 基电子态 $^4A_2$ 和基质的晶格振动发生耦合，形成 701～858nm 宽范围的离子振动带，可以在脉冲或连续波的方式下运转。染料激光器也是使用较广的一种可调谐激光器，但输出功率较小，且染料分子会因产生光解而消耗。

可转移元素的测定 determination of migration of certain elements 利用适当的工具制备测试样品，使测试样品的大小尺寸达到一定要求后，在一定的温度、振摇速度、pH 值等条件下用酸性溶液对测试样品进行萃取，通过过滤或者离心等方法得到澄清的萃取溶液，用原子吸收光谱法、ICP-AES 光谱法等测定玩具中可转移元素锑、砷、钡、镉、铬、铅、汞、硒等 8 种元素的含量。

客体 guest 通过分子间相互作用，一分子将另一分子包结形成复合体。一般将包结一方称为主体或受体，被包结一方称为客体。主客体包结物亦称为主客体络合物。主、客体的合成、结构、相互作用以及分子功能是分子识别化学、超分子化学研究的重要内容。

克拉贝龙-克劳修斯方程 Clapeyron-Clansius Equation 当物态改变时（如熔化、蒸发、凝固、冷凝），压力 p 随温度 T 变化而发生变化

$$\frac{dp}{dT}=\frac{\Delta H}{T\Delta V}$$

对于蒸发，ΔV 近似为蒸气的偏摩尔体积。由上式可得

$$\frac{d(\ln p)}{dT}=\frac{\Delta H}{RT^2}$$

此式称为克拉贝龙-克劳修斯方程。式中，p 为温度为 T 时蒸气压；R 为气体常数；ΔH 为状态变化而引起的焓变；ΔV 为两个物态之间的摩尔体积之差。此方程在蒸馏和气-液色谱中非常有用，它可以从一个温度下的蒸气压推算另一个温度下的蒸气压。

克拉克氧电极 Clark oxygen electrode 由阴极、阳极、电解液以及阴极表面上的氧透过性塑料膜构成的膜式氧传感器。它利用氧透过性塑料膜在阴极表面发生电化学还原，产生的电流正比于氧的分压，从通过的电流值可测定气相中氧的浓度。

克隆 cloning 用无性繁殖的方法产生一组遗传上相同的细胞和生物群体的过程。这些细胞和个体均来自无性繁殖的单一原型细胞。利用 DNA 重组技术，可使一个基因或 DNA 片段产生出很多相同的拷贝，这叫分子克隆或 DNA 克隆。

刻划光栅 ruled grating 为了获得具有细微的平行、等宽、等间隔的光栅线，通常采用精密光栅刻划机，用金刚石刻划刀在光栅坯表面的反射金属膜（铝或金膜）上逐一刻划出栅线沟槽，这样制成的光栅称为刻划光栅。光栅刻划是最精密的机械工艺，要求达到

每毫米 600 线、每毫米 1200 线甚至每毫米 2400 线的平行、等宽、等间隔精微刻划，而且栅距误差 $\Delta d < \frac{d}{100}$、栅线不平行度 $< \left(\frac{1}{100} \sim \frac{2}{100}\right)d$，这是非常精密的工作。因此，对光栅刻划机的精度、金刚石刻划刀的晶向和刃磨、刻划工作室的恒温、防震要求是顶级严格的。一块每毫米 1200 线、有效工作面尺寸为 $100 \times 100mm^2$ 的刻划光栅，至少要连续刻划 5 昼夜，期间整个工作室温度变化不得超过 0.01 ~ 0.03℃、刻划机区的震动振幅不得大于0.1μm！所以一块高质量刻划光栅是极难制得的，因而价格十分昂贵，不可能直接用于商品光栅光谱仪，而是将其作为"模版"大量制取复制光栅用于仪器。

空间场流分级 space field flow fraction 一种场流分级分离方法。流体在薄的柱槽中流动时的流速分布为抛物线型。大小粒子在重力场作用下均沉降于柱槽的下壁，当被分离粒子尺寸变大，至粒子半径 α 与柱槽厚度 ω 之比达到 $0.01 < \frac{\alpha}{\omega} < 0.1$ 时，大粒子进入流速较高的区域的几率增大，结果是大粒子流动速度快，而小粒子则流速较慢，大粒子先从柱槽中流出。这与一般场流分级的淋出顺序相反。根据这种分离原理建立起来的场流分级方法称为空间场流分级技术。空间场流分级不需要对柱槽壁加热，其近似的保留方程为

$$\frac{V_r}{V_0} = \frac{\omega}{6\alpha}$$

式中，V_r，V_0 分别为峰保留体积和柱槽体积。空间场流分级主要用于 1 ~ 100μm的颗粒的直径及其分布的分离和测定。例如血液、酶、色谱填料粒子、硅球、聚合物微球以及粉体材料的分离。

空间分辨率 space resolution 探针在 x-y 平面方向的分辨率，即束斑大小。是衡量仪器性能的一个重要指标，也是考察微区分析能力的一个重要指标。它受很多因素的影响，如粒子束的聚焦性能、样品的表面粗糙度等。在实际应用中，可以通过标准样品进行鉴定。

空间分布干扰 space-distribution interference 自由原子在火焰中的分布改变引起的干扰。自由原子在火焰区的分布是不均匀的，取决于被测元素的化合物形态和火焰不同区域的氧化还原特性。对于给定火焰，燃气和助燃气比例、试样组成的变化，有机溶剂的引入，都直接引起火焰状态和氧化还原特性的改变。进样速度的变化，将引起气溶胶粒度大小及其分布发生变化。以上诸因素的任何变化，都将影响自由原子在空间的分布，从而使得在测光区所测得的分析信号亦将随之改变。

空间群 space group 晶体结构具有空间点阵式的周期性结构，点阵结构的空间对称操作群称为空间群。将晶体中可能存在的全部对称元素（空间点阵形式、对称中心、镜面、

旋转轴、反轴、螺旋轴、滑移面）按一切可能相结合，可导出230种对称元素系，与此对应的对称操作群即为230种空间群。

空间群符号 space group symbol 用字母和数字简明地表示空间群对称性的符号。空间群的国际符号由两部分组成：第一部分用一个英文大写字母（如 P、A、B、C、I、F 或 R）表示空间群的空间点阵形式，第二部分依据晶系不同，由1到3个位置所组成，分别用对称元素符号表示不同方向上所具有的基本对称元素。如果既要表示平行于指定方向的旋转轴（包括旋转轴、螺旋轴和反轴），又要表示垂直于指定方向的对称面（包括镜面和滑移面），则将旋转轴表示为分子，对称面表示为分母。三斜晶系只有两种空间群，只需要说明在原点处是否存在对称中心，即：$P1$ 和 $P\bar{1}$。单斜晶系也只需要一个位置，列出在 b 方向上的基本对称元素，如 $P2_1/c$。正交晶系需要三个位置，分别对应于 a、b、c 三个方向，如 $Fmmm$。四方晶系的三个位置分别是 c、a 和 $a+b$ 方向，如 $P\frac{4_2}{m}bc$（也可写作 $P4_2/mbc$）。六方晶系的三个方向是 c、a 和 $2a+b$ 方向。三方晶系有两种空间点阵型式，如果是简单六方格子则三个方向与六方晶系相同，如果是六方R心格子，则只需要前面两个方向就够了。立方晶系的三个方向是 a、$a+b+c$ 和 $a+b$ 方向，如 $Fm3m$。

空间性谱带加宽 band broadening in space 参见**溢流区**条。

空气隔断流 air segmented stream 是连续流动分析技术的特征之一，即由一道蠕动泵管按一定的流量输送空气到分析系统中去，并形成间隔均匀的一个一个的空气泡，这就是隔断流。通常认为空气泡有三个作用：(1) 保证样品的完整性，防止样品之间的混合；(2) 帮助样品与试剂的混合与反应；(3) 保证液流特征和系统状态的目视校正。即看一看空气泡的运行情况，就能判断分析系统是否正常。

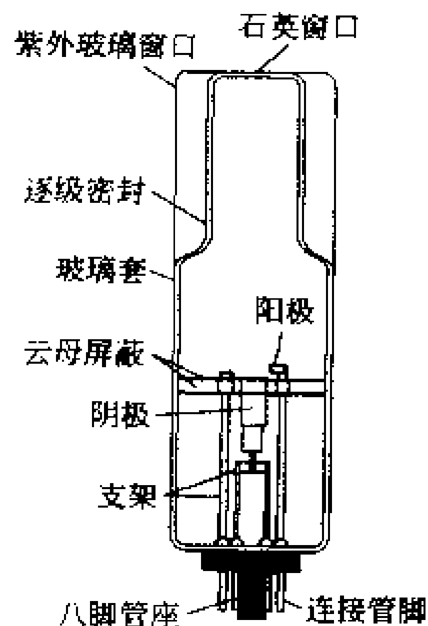
空气冷却炬管 air-cooled torch tube 即用空气冷却的炬管，一般采用空气外冷式。由于空气带走功耗有时占总入射功率的75%以上，因此这种改进型炬管仍未得到广泛地应用。

空气-氢气火焰 air-hydrogen flame 氢气在空气中燃烧形成的火焰。在室温下，可燃极限的上、下限分别为75%和4%，最低着火温度是803K，最大燃烧速度是310cm·s^{-1}，最高火焰温度计算值是2373K，测量值是2318K。火焰的燃烧产物中含有 H_2O、O_2、O、H_2、OH、NO、N_2 等，没有含碳还原性化学物质，是氧化性火焰。特点是背景发射和背景吸收低，特别是在<230nm区，自吸收很低，对于分析线位于该光谱区的元素的测定是有利的。氢气是具有高扩散性危险气体，使用时要特别注意安全。

空气-乙炔火焰 air-acetylene flame 乙炔在空气中燃烧形成的火焰。在室温下，可燃极限的上、下限分别为80%和2.5%，最低着火温度是623K，最大燃烧速度是158cm·s^{-1}，最高火焰温度计算值是2523K，测量值是2500K。火焰的燃烧产物中含有C、CH、CO_2、CO等还原性组分，有利于元素的原子化。在<230nm区，特别是富燃火焰，透射性不很好，有明显的吸收。它燃烧稳定，噪声低，使用安全，宜于操作。调节燃气与助燃气比例，可以方便地获得不同氧化还原特性的火焰，以适合于不同元素的测定，除易形成难解离氧化物的元素B、Be、Al、Ti、Zr、Hf、V、Nb、Ta、W、Th、U、稀土等外，对多数元素都有足够高的测定灵敏度。

空心光纤 hollow optical fibre 即薄壁管状光导纤维，材料为石英，其折射率为1.462。用液芯光纤测定共振拉曼光谱时，要求空心光纤内径均匀，内表面光滑，使拉曼信号的损失减至最小。

空心阴极灯 hollow cathode lamp; HCL 一种广泛用于原子吸收光谱分析的锐线光源。空心阴极灯是一种阴极呈空心圆柱形的特殊气体放电管。空心阴极放电是一种高压小电流辉光放电的一种特殊形式，放电集中在阴极腔内，形成强大的负辉光区。典型的空心阴极灯的结构如右图所示，当在气体放电管的两电极上施加足够高的电压，便开始放电，电子在飞向阳极的过程中在电场的作用下受到加速，与管内载气的原子碰撞，使受碰撞的原子电离。带正电荷的载体离子从电场中获得动能，当其撞击在金属阴极表面，且其动能足以克服金属阴极表面的晶格能时，就能将原子从晶格中溅射出来。被溅射出来的原子积聚在空心阴极腔内，再与电子、离子以及原子产生非弹性碰撞而获得能量，受到激发，发射被测元素的特征共振线。原子吸收光谱分析中使用的空心阴极灯普遍采用方波、脉冲供电，使其发出的光按调制波形变化，仪器交流放大器只接收和放大检测器所产生的这种调制电信号，不放大火焰发射产生的直流电信号，从而消除了火焰发射的影响。空心阴极光源的优点是易于在广泛的光谱区获得锐线光谱，光谱强度大，稳定，工作寿命长。



空穴色谱法 vacancy chromatography 以被分析样品或用载气稀释的

样品作为流动相，而把一定量的纯载气作为样品注人色谱柱，在柱的出口进行检测，可获得一组分离后的色谱峰，这种方法称为空穴色谱法。如果在空穴色谱法中所用的固定相和其他操作条件与普通气相色谱法中所用条件完全一样时，那么二者所得到的色谱图则是相同的。此法适用于工业流程的控制，直接以流程气体作为流动相，测定流程气体中的组分分布。

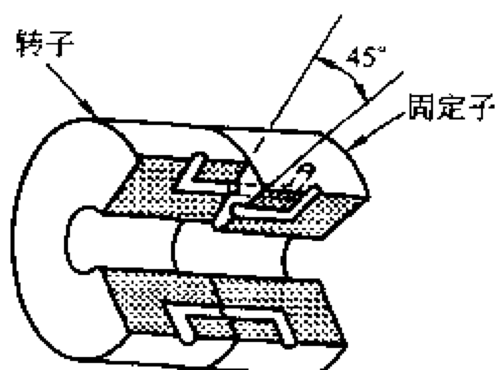
孔结构 pore structure 孔结构主要指孔直径、孔容、孔的比表面积、孔密度等。一般高分子聚合物树脂中都是带有孔的，孔结构直接影响到树脂的性能。如在色谱固定相中，有时需要用均一孔径的树脂，从而能够达到更好的分离效果。

孔径 pore diameter 多孔性材料上孔隙的大小（直径）。多孔性色谱固定相载体的孔径通常在数纳米至数十纳米。

孔径分布 pore size distribution 指所有孔隙的孔径大小所分布的范围。对色谱填料而言，孔径分布范围越窄，色谱峰的展宽越小。

12 孔注入阀 12-port injection valve 是双层结构，定子和转子在同心圆上各有 6 个对应的直角孔道。无沟槽，转角为 60°。其功能有单道注入、双道合并带注入、双道异步连续注入、以及用 3 个定量环同步采液或注入的流路安排。

16 孔注入阀 16-port injection valve 又称夹层带阀（sandwich zones valve），是日立公司于 1983 年推出的。系双层结构（阀芯部分见下图），在转子和定子的同心圆上按等距离对称分布各有 8 个直角孔道，无沟槽。孔道之间可根据需要互连或与流路连接。转子由步进电机带动，可定时按正向或反向旋转 45° 角。其功能有单流路注入、双流路同步合并带注入、双流路异步连续注入、4 种夹层带注入方式、三道标准同时顺序注入、2 种区域采样法、试样试剂追踪注入法、5 种反应注入法、6 种长反应周期注入法和 6 种阀停流注入模式等，它是目前 FIA 功能最齐全的注入阀。



空白溶液 blank solution 在制备试样溶液相同条件下制备的，含有与试样溶液所用的全部试剂，但不含被测组分的溶液（此时称为试剂空白）。在试样测定时用作参比，以扣除过量反应试剂（显色剂）及缓冲剂、掩蔽剂等的影响。分光光度法中，当待测试液在测量波长处有吸收，而显色剂等无吸收时，还采用一种不加显色剂的溶液作参照进行吸光度测定。这种不加显色剂的参照溶液称为试样空白。

空白试验和空白值 blank test and

blank value 空白试验是指在不加待测组分的情况下，按照分析待测组分同样的条件和步骤进行的试验。试验所得结果称为空白值。从试样分析结果中扣除空白值后，可消除由所用水、试剂和器皿带进杂质所引起的系统误差，从而可得到比较可靠的分析结果。

空白值控制 control of blank value 在分析测试中为使空白值控制在所允许的水平，最好是使空白值降至接近于零或至少相对于被测量含量水平而言可以忽略不计，所必须实施的全部有计划有系统的活动。通常用空白值控制图实施控制，以多次测得的空白值的平均值 $\overline{x}_0$ 为中心控制线，以 $UCL = \overline{x}_0 + 2S_0$ 为控制上限，其中 S_0 是空白噪声（测定空白值的标准偏差）。在痕量分析中，空白值水平和噪声是测定限与检出限的限制因素，控制和减小取样、试剂、容器、操作等引入的各种来源的玷污，是减少空白值及其噪声，从而降低测定限与检出限的有效途径。

空表面态 unoccupied surface state 未被电子占据的表面态叫空表面态。表面态是指局域在表面上的电子态。

控制单元 control unit 在色谱装置中用于控制各部件运转和条件变更的单元。也有的新型色谱仪是由色谱软件通过连接在仪器各功能部分的控制部件分别直接控制色谱仪的各个部分。

控制电流电重量分析法 controlled-current electrogravimetric analysis 通过调节外加电压使电解电流恒定，使被测离子在电极上电解析出，由电解所增加的质量求算出被测物质的含量的方法。此法可测定锌、镉、钴、镍、锡、铅、铜、铋、锑、汞及银等金属。装置较简单，准确度可达0.2%，分析时间较短，但选择性较差。

控制电流库仑法 controlled-current coulometry 又称库仑滴定法。是由电解进行的时间和电流强度求算出被测物质的量的方法。由恒电流发生器产生的恒电流通过电解池，用计时器记录电解时间，被测物质直接在电极上反应或在电极附近由于电极反应产生一种能与被测物质起作用的试剂，当被测物质作用完毕后，由指示终点的仪器发出信号，立即关掉计时器。该法能用于容量分析的各类滴定，可用于有机化合物和金属络合物的反应机理及电极过程的研究，也可用于络合平衡的研究。

控制电位电解法 controlled-potential electrolysis 通过控制电解电位使其恒定，只让被测离子在电极上电解析出，由电解所增加的质量求算出被测物质含量的方法，此法可用于提纯分析试剂，分离干扰杂质，特别适用于除去试样的基体，测定其中的微量组分。

控制电位库仑法 controlled-potential coulometry 电解时，用恒电位装置控制阴极电位，以100%的电流效率进行电解，当电流趋于零时，由库仑计测得电量，从而求出被测物质含

量的方法。该法适用于混合物质的测定，可用于50多种元素及其化合物的测定，在有机和生化物质的合成和分析方面的应用也很广泛，同时也是研究电极过程、反应机理等的有效方法。

控制试样法 method of control sample 采用一个已知含量的试样和待测试样同时摄谱，根据已知试样的分析线对相对强度（黑度差）来校正工作曲线的移动量。这个已知含量的试样称为“控制试样”，这种分析方法称为“控制试样法”。控制试样法用于复杂合金的分析有相当大的好处。因为在复杂合金中，第三元素的影响有时使工作曲线产生平移，此时可以控制试样进行校正。

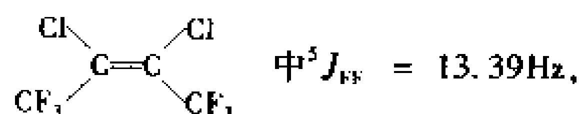
控制限 control limit 在质量控制中允许被控制的产品特性量值的平均值波动的界限。在质控图中，用虚线表示在中心控制线的上、下两侧，作为产品特性量值的上、下控制线。位于控制中心线上侧的控制限，称为上控制限；位于控制中心线下侧的控制限，称为下控制限。通常以特性量值的标准差的3倍值作为控制限，这预期在正常的情况下，有99.7%特性量值落在控制限内，若实际情况像所预期的那样，表明生产过程处于统计控制状态。

控制中心线 control central line 简称中心线，记为CL。质量控制图中代表所控制产品特性量值的平均值的实线。在实线的上、下两侧各设置一条虚线，表示产品特性量值允许波动的限度。如果抽样检验测得的产品特性量值落在控制限内，且随机地分布在中心控制线的两侧，表示生产过程处于统计控制状态。若特性量值落在控制线以外，表明生产过程失控，需采取措施使生产过程恢复正常。若特性量值虽落在控制线内，但呈现某种趋向性（连续上升或下降）分布，表明生产过程有出现失控的潜在可能性，应引起重视，及时查明原因。

库仑分析法 coulometry 是1938年L. Szebelledy和Z. Somogyi首先提出的，其理论基础是法拉第定律，是在电解分析法的基础上发展起来的一种分析方法，是通过测量被测物质在100%电流效率下电解所消耗的电量来进行定量分析的方法。库仑分析有两种形式：一种是恒电位库仑法，相当于控制电位电解；另一种是恒电流库仑法，也称库仑滴定法。

库仑计 coulometer 是控制电位库仑分析装置中的一个重要组成部分，用来测量电量。

跨越空间的耦合 coupling spanned space 当磁性核在空间接近到一定距离时产生电子自旋的直接关联，导致“跨越空间”的耦合。比如顺式



远远大于反式时



中$^5J_{FF}$ = 1.44Hz。顺式中两个CF_3中的F在空间显然相当靠近，导致相当大的$^5J_{FF}$。

块角矩阵最小二乘修正 block matrix least-squares refinement 晶体结构测定中，一种优化结构模型的最小二乘计算方法。此法假定一部分晶体结构参数（如一部分原子的坐标参数和热振动参数）的变动对另外一部分结构参数没有影响，可以分步对各部分结构参数进行优化。其优点是可以节省计算机内、外存空间和计算时间，但是，所得的结果不够精确，一般在结构修正的初始阶段中使用，或用于修正由几个独立的分子或是离子团构成的晶体结构。

快粒子轰击电离 fast particle bombardment; FPB 质谱分析中，利用具有数千到数万电子伏特动能的原子、分子或者离子对样品进行轰击，来实现样品离子化的总称。如快原子轰击、二次离子质谱等。

快扫描红外分光计 rapid scanning infrared spectrometer 其光学设计有两种类型：一种是单色器快速转动或振荡，反射镜固定；另一是单色器不动，反射镜快速转动或振荡。红外光通过内光路反射至反射镜，经出射狭缝投射到快速响应的检测器进行检测，并转换为电信号，经高频放大器放大，在示波器上显示出光谱信号。快扫描红外分光计在特殊情况下，配置有相关采样系统可实现微秒（μs）级的扫描，用来研究快速化学反应，不稳定分子和自由基等。

快速分析 fast analysis 在保持一定精确度的情况下，为适应生产需要，而改进操作步骤，尽可能地缩短时间的一种化学分析方法。通常在分析某些项目时，从试样处理开始，时间一般不超过 1h 就能得到结果。这种方法已在生产过程中广泛应用，如炉前分析。由于数字仪表及电子技术的使用，此法已逐渐向自动化分析方面发展。

快速冷冻技术 rapid freezing technique 检测溶液中短寿命自由基的方法之一。类似于快速流动（混合）法，将两种或三种反应液混合反应，同时迅速将混合液喷到经液氮等冷媒冷却的收集器中，使混合液快速冻结，使反应中产生的自由基不会很快消失，有利于进行 ESR 检测。

快速流动（混合）法 rapid flow (mixing) method 在化学反应过程中常产生短寿命自由基。为了观测溶液中的短寿命自由基（一般其寿命在 10ms 以上）的 ESR 谱，可采用快速流动（混合）法，即将两种或三种反应液分别按一定流速导入特制的样品池内，使它们能相互迅速混合反应后流入样品管进行测试。因为可不断排除反应完的溶液并补充新的反应液，始终保持样品池内有一定量的自由基产生，从而可以满足检测自由基的需求。例如 Ti^{3+} 与 H_2O_2 水溶液迅速混合反应可生成高活性的 OH 自由基，用此法可检测由 OH 自由基与乙醇、二甲基亚砜等溶剂反应所形成的自由基。

快速色谱法 high-speed chromatography 采用短柱和简单的加压方法进行快速分离制备的（液相）色谱

方法。色谱柱是一根尾端带活塞开关的玻璃柱，淋洗剂容器的出口端与柱顶端磨口相接，淋洗剂容器的上端与惰性气体（氮气）钢瓶相接，调节钢瓶出口压力给色谱柱以适当的压力。它与短柱色谱类似，只不过短柱色谱所用色谱柱可以是耐压的不锈钢柱管，可以采用各种加压方式（如中或高压），而快速色谱是利用实验室廉价易得的常规玻璃仪器和氮气源。

快原子轰击电离 fast atom bombardment; FAB 质谱常用的一种软电离方法。在离子枪中，用电子轰击的方法使高压中性气体（氩或氙）电离，形成的氩（或氙）离子被电子透镜聚焦，经过一个中和器，中和掉氩或氙离子束所携带的电荷，成为定向高速运动的中性原子束，高速中性原子（Ar, Xe 等）对溶解在基质中的样品溶液进行轰击，在产生“爆发性”汽化的同时，发生离子-分子反应，从而引发质子转移，最终实现样品离子化。一般可生成 $[M+H]^+$、$[M-H]^-$、$[M]^{+}$ 及 $[M+Na]^+$ 等分子离子以及少数碎片离子。

快原子轰击（离子）源 fast atom bombardment source; FAB 用于质谱仪的一种“软”电离离子源。由电子枪、电子聚焦透镜、中和器组成。用产生的高速定向运动的中性原子束，或采用铯离子枪产生快速铯离子，轰击有机化合物，使有机化合物电离。有机化合物通常与底物混合涂在靶板上，得到的是有机化合物与底物作用生成的准分子离子和少量碎片。快原子轰击源被广泛用于分析难挥发、热不稳定、强极性、大分子的有机化合物。虽然目前更多的使用电喷雾电离和基质辅助激光解吸电离方式，但对寡糖的分析，仍使用快原子轰击源。

快原子轰击质谱 fast atom bombardment mass spectrometry 一种质谱分析方法。用快速 Ar 原子（或 Xe 原子）轰击涂敷在某种底物靶面上的试样，使试样分子发生离子化，然后进行质谱分析从而获得样品表面元素组成的一种方法。由于其剥离速度很快，一般不适合进行表面分析，但可以用来分析体相物质的成分和结构。

快原子枪 fast atom gun 快原子轰击质谱中产生快原子的装置。有鞍形场枪及电荷交换枪。前者是使高能离子穿过位于鞍形电场中的电子云，捕获一自由电子而转变为快原子；后者是将高能离子加速进入残余的未离子化的气体中，发生近距碰撞，通过共振捕获现象，快离子得到一个电子而变为快原子。

宽带去耦 Broad Band decoupling; BB 对耦合核在其全部化学位移范围内同时去耦的技术。^{13}C 的天然丰度低（$N=1.1\%$），因此 ^{13}C—^{13}C 之间的耦合峰只是主峰的 6×10^{-5}，可忽略。然而有机物的碳核与 ^1H 核一般直接结合，^{13}C 与 ^1H 之间的多重耦合 $^1J_{CH}$、$^2J_{CH}$、$^3J_{CH}$，也常有远程耦合，因此对 ^1H 不去耦的 ^{13}C 谱因耦合的多

重谱线互相重叠而变得非常复杂，不便指定其归属。用去耦射频频率对准^{1}H谱谱宽中心，并用噪声发生技术使其带宽足以覆盖整个质子图谱（化学位移范围大于10），这样所有质子都受到辐射而被去耦，所有^{13}C都呈单线。质子宽带去耦是常用的技术，全去耦的^{13}C谱已成为常规^{13}C谱。除^{13}C外，^{15}N、^{19}F、^{31}P等核的NMR谱也可用质子宽带去耦得到没有氢耦合的去耦谱。若这些核既有^{1}H又有另一种核与它耦合的话，则应通过三共振去除它们的耦合以获得去耦谱。

矿石分析 analysis of minerals 矿石分为金属矿和非金属矿两大类。我国常检进、出口矿石主要有铝矾土、重晶石、高岭土、膨润土、菱镁矿、铁矿石、锰矿石、铬矿石以及铜精矿、铅精矿、锌精矿、锡精矿、钨精矿和铝精矿等。进出口检验常用的检验标准有GB（中国国家标准）、ISO（国际标准）、JIS（日本工业标准）、BS（美国国家标准）、SN（检验检疫行业标准）等。矿石的分析过程较为复杂，主要原因是样品分解难度大，常用的分解法为碱融法和酸溶法，多数非金属矿只能用碱融法分解样品。常用的分析方法为化学法、比色法和仪器分析法。

矿物的差热分析特征谱图 differential thermal analysis characteristic figures of ore 该谱图是指已知矿物的热分析曲线，并对各热效应有明确的解释。矿物的差热曲线和热重曲线会因其组成和结构的不同而表现出不同的特征，因此可通过与已知的矿物特征谱图进行对比来鉴定矿物。由于热分析的数据具有程序性的特点，所以要注意实验条件所引起的实验结果的差异。

矿物油测定 the determination of mineral oil 水中矿物油来自工业废水和生活污水的污染。测定的矿物油是指溶解于特定溶剂中而收集到的所有物质，包括被溶剂从酸化的样品中萃取并在试验过程中不挥发的所有物质。因此，测定方法不同，矿物油中被测定的组分也不同。测定方法有重量法，非色散红外法、紫外分光光度法和荧光法等。一般先将样品用硫酸酸化，使$pH<2$，接着用有机溶剂萃取，然后按不同的方法用天平、红外光谱仪、紫外光度计等进行测定。

采集的样品必须有代表性。当只测定水中乳化状态和溶解性油时，要避开漂浮在水表面的油膜。一般在水表面以下20～50cm处取水样。样品要收集在广口定容的清洁玻璃瓶中。为保存水样，采集样品前，可向采集瓶内加3～5ml·L^{-1}(1+1)硫酸；若样品不能当天分析，可置于低温4℃下保存。

醌-氢醌电极 quinhydrone electrode 是用一片清洁光亮的铂片或金片浸到醌和氢醌的等分子的饱和溶液中即成。在25℃时，测得其标准电位为：0.69992V及0.69961V（平均值为0.69976V，相对于氢电极）。由于醌-

氢醌电极易制备，电位很快达到平衡，电阻低等优点，应用较广。但要注意以下几点：（1）只能应用于 pH 值低于 8 的溶液，pH 值在 8 以上作为弱酸的氢醌开始解离或被氧化成醌，引起误差；（2）当溶液中有强氧化性或还原性物质如重铬酸盐，高锰酸盐，二价锡，亚硫酸盐，硫代硫酸盐等会引起醌和氢醌的比例变化而产生误差，同时也不能用于硼酸盐的测定；（3）有中性盐时，要产生"盐误差"，因盐对氢醌和醌的活度系数影响不同。在离子强度低于 0.5 $mol \cdot kg^{-1}$ 溶液中，盐误差不超过 0.03 个 pH 单位。

扩散 diffusion 在一种势能梯度驱动下物质输运的过程。这种势能梯度可以是活度梯度（或化学势梯度）、压力梯度、温度梯度、电位梯度、磁场梯度等。物质在活度梯度存在下的扩散是分离过程中的一种最重要的自发输运过程，遵循菲克第一定律和第二定律。利用物质在不同介质中扩散速度的差别可使某些组分达到分离的目的。例如，在薄层色谱中，大分子与小分子可以通过扩散速度的不同得到分离。但扩散又可能造成许多分离过程的谱带扩展，分离效率下降，分离速度减小等不利于分离的动力学因素。因此，为建立高效分离方法，研究分离过程中物质扩散的规律是必要的。

扩散传质 mass-transfer by diffusion 指物质在介质中由于其浓度不同通过扩散作用由高浓区向低浓区的定向运动。

扩散电流 diffusion current 当电流通过化学电池时，因扩散传质过程所贡献的那部分电流。当电流通过化学电池时，由于电极反应使阴极表面附近反应物的浓度降低，反应物出现浓度梯度，使之从本体向电极表面扩散。电流增加，反应速度加快，电极附近的浓度梯度增大，反应物从本体向电极附近的扩散速度加快。当反应物因电极反应所消失的数量与由本体向电极表面扩散的数量相等时，就建立了不随时间而变的稳定状态，这时的电流称扩散电流。

扩散火焰 diffusion flame 燃气与助燃气不预先混合，靠火焰周围的大气扩散或夹带进入火焰以维持燃烧的一种火焰。用惰性气体氩（或氮）作喷雾气和稀释气，与氢气混合后输送到燃烧器，在燃烧器外与扩散或夹带进入火焰的空气中的氧产生化学反应形成火焰。它燃烧速度低，温度低，透射性能好，背景发射弱，使用安全。

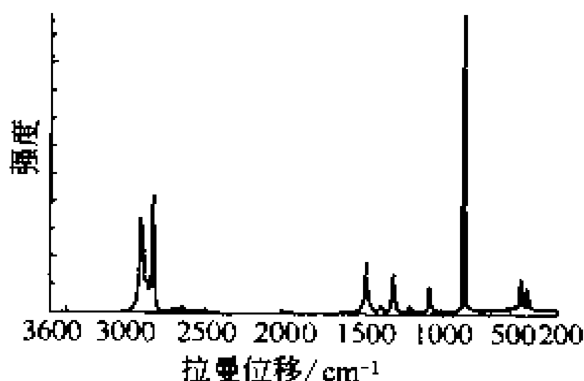
扩展的 X 射线吸收精细结构 extended X-ray absorption fine structure; EXAFS 在吸收限的高能侧 30～1000eV 的能量范围内，多原子气体或凝聚态物质的 X 射线吸收系数随入射 X 光子能量的增大而起伏振荡的精细结构。这一区域的光谱特征起源于从中心吸收原子发射的光电子波与其第一配位层原子背散射回来的光电子波相互作用，产生干涉，在某些能量处相互加强、在某些能量处相互

减弱，使光电吸收的几率发生变化，从而引起吸收系数的振荡。研究EXAFS光谱图，可以获得吸收原子的短程结构信息，如第一配位层原子的配位数、距中心原子的距离及氧化态等。此法可用于无定形物质及分散相物质的分析。

L

拉曼非活性 Raman inactivity 拉曼光谱是属于分子光谱。若分子的某一基频振动频率不在拉曼光谱中出现，就称之为拉曼非活性。定量计算分子的某一跃迁是否是拉曼非活性，可用量子力学理论计算。如果分子从 n 态到 m 态之间的拉曼光谱跃迁矩 $(\alpha_{ij})_{nm}$ 等于零，则是拉曼非活性的。简言之，若某一简正振动对应于分子的极化率的改变为零，即 $\left(\frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial r}\right)=0$，则是拉曼非活性的。参见拉曼活性条。

拉曼光谱 Raman spectra 拉曼光谱是分子的振动和转动光谱，它是分子对单色光的散射所产生的光谱。每一种物质（分子）都有自己的特征拉曼光谱，这是拉曼光谱表征某一物质的依据。拉曼光谱图的纵坐标是散射强度，横坐标是拉曼位移，单位是波数（cm^{-1}），下图是环己烷分子的



拉曼光谱图。

拉曼光谱电化学法 Raman spectroelectrochemistry 将激光拉曼光谱技术和电化学相结合的一种研究方法。该法已应用于铅、银、铜、镍、钴等金属阳极腐蚀膜的现场检测，是一种非常有价值的技术。还可以研究电极过程的动力学和电极/溶液界面的性质。

拉曼活性 Raman activity 拉曼光谱是属于分子光谱。分子的某一基频振动谱带出现在拉曼光谱中，就称之为拉曼活性；反之，该谱带不出现在拉曼光谱中，则称之为拉曼非活性的。定量计算分子的某一跃迁是否是拉曼活性，需用量子力学的理论。分子从 n 态到 m 态之间的拉曼光谱跃迁矩由下式积分表示

$$|(\alpha_{ij})_{nm}| = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^* \alpha_{ij} \varphi_n \mathrm{d}\tau$$

式中，φ_m^* 和 φ_n 是分子的 m 态和 n 态波函数；α_{ij} 是极化率的跃迁算子；若跃迁矩 $(\alpha_{ij})_{nm}$ 不等于零，则是拉曼活性的。简而言之，如果某一简正振动对应于分子的极化率的改变不为零，即 $\left(\frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial r}\right) \neq 0$（$r$ 为原子核简正坐标），则是拉曼活性的。

拉曼散射 Raman scattering 光子与分子相互作用时，不仅光子的运动方向发生改变，且光子与分子之间发生能量交换：或者光子的一部分能量传递给分子；或者光子从分子的振动或转动得到能量。这种光散射现象是1928 年印度物理学家拉曼（Raman）发现的，故称之为拉曼散射。

拉曼位移 Raman shift 当单色光光子与分子相互作用发生拉曼散射时，散射光的频率不同于入射光频率，入射频率与散射频率之差就称为拉曼位移。其单位为波数（cm^{-1}）。位移为正数的是斯托克斯散射线，位移为负数的是反斯托克斯散射线。由于斯托克斯线与反斯托克斯线是完全对称地分布在瑞利线的两侧，所以在拉曼光谱中的拉曼位移一般只是记录斯托克斯散射线（因反斯托克斯散射强度比斯托克斯散射强度弱很多）。每一物质的拉曼位移与入射光的频率无关。

拉平效应 leveling effect 亦称致平效应。当溶剂对质子的亲合能力远大于某些酸的共轭碱对质子的亲合能力时，这些酸几乎可将全部质子都传递给溶剂，从而无法分辨这些酸的强度的效应。例如，相同量的 $HClO_4$、HCl 和 HNO_3 在水溶液中，由于它们几乎都可将全部质子传递给水分子，形成水合质子（简写为 H_3O^+），从而不能分辨这些酸在水溶液的酸强度。

拉平性溶剂 leveling solvents 能起拉平效应的溶剂。参见**拉平效应**条。

兰缪尔吸附等温式 Langmuir adsorption isotherm 适用于吸附过程中的单分子层吸附现象。由兰缪尔于1918 年提出。在任意气体压力 p 下，平衡时被占有的吸附位置的分数是 θ，空着的吸附位置的分数则为 1 −

θ，吸附速率与 $M(1-\theta)$ 及气体的压力 p 成正比，而脱附速率与 $M\theta$ 成正比，其中 M 为表面含有的吸附位置。在吸附到达平衡时两个速度相等，得到

$$\theta=\frac{\frac{k_1}{k_2}p}{1+\frac{k_1}{k_2}p}=\frac{bp}{1+bp}\qquad\left(b=\frac{k_1}{k_2}\right)$$

式中，k_1、k_2 为与 θ 无关的常数。在足够高的压力下，θ 接近于 1，而被吸附气体的体积接近于 V_m（即最大吸附体积），以 $\theta=\frac{V}{V_m}$ 代入，则

$$V=\frac{V_m bp}{1+bp}$$

这就是兰缪尔吸附等温线方程。以 $\frac{V}{p}$ 对 V 作图，可测定多孔物质的比表面积。也可用于测定气体分子的大小。

蓝移 blue shift 亦称紫移。因使用不同溶剂或引入取代基所引起的化合物吸收光谱的吸收峰向短波长方向的移动。例如，羰基中氧的孤对(n)电子引起 $n\to\pi^*$ 跃迁，在极性溶剂中就发生蓝移。这是由于激发态氧原子形成氢键的程度比基态时低所致。

蓝硬型感光板 blue-hard photographic plate 指天津感光胶片厂出产的光谱感光片的一种型号。其性能指标为灵敏度：20±5，反衬度：2.0±0.2，雾翳：<0.06，感光范围在 250～500nm 之间。

朗伯-比耳定律 Lamber-Beer law 有时又称布格(Bouguer)-朗伯(Lamber)-比耳(Beer)定律。当一束平行的单色光通过一定均匀的某吸收溶液时，该溶液对光的吸收程度 $A=\lg\frac{I_0}{I}$ 与吸光物质的浓度 c 和光通过的液层厚度 b 的乘积成正比。这种关系称为朗伯-比耳定律，其数学表达式为

$$A=\lg\frac{I_0}{I}=Kbc$$

式中，A 称为吸光度；I_0 和 I 分别为入射光和透射光的强度；b 为光通过的液层厚度；c 为吸光物质的浓度；K 为比例常数。b 的单位为 cm，若 c 的单位以 $mol\cdot L^{-1}$ 表示，则用 ε 表示 K，ε 称为摩尔吸光系数，单位为 $L\cdot mol^{-1}\cdot cm^{-1}$；若 c 的单位以 $g\cdot L^{-1}$ 表示，则用 a 表示 K，a 称为吸光系数，单位为 $L\cdot g^{-1}\cdot cm^{-1}$。由于吸光度与吸光物质浓度的关系（液层厚度一定时）最为重要，因此有时又被简称为比耳定律。

劳埃方程 Laue equation 联系衍射方向和晶胞大小、形状的方程之一，其形式如下

$$\begin{cases}a(s-s_0)=h\lambda\\ b(s-s_0)=k\lambda\\ c(s-s_0)=l\lambda\end{cases}$$

或

$$\begin{cases}a(\cos\varphi_a-\cos\varphi_{a0})=h\lambda\\ b(\cos\varphi_b-\cos\varphi_{b0})=k\lambda\\ c(\cos\varphi_c-\cos\varphi_{c0})=l\lambda\end{cases}$$

方程中，$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 是晶胞的单位基矢；$\boldsymbol{s}$ 和 $\boldsymbol{s}_0$ 分别是衍射 X 射线和入射 X 射线的单位矢量；a、b、c 则是晶胞的轴长；φ_{a0}、φ_{b0}、φ_{c0} 是入射线与三个晶轴的夹角；φ_a、φ_b、φ_c 是衍射线与三个晶轴的夹角；λ 是入射 X 射线的

波长；h、k、l 是衍射指标，它们规定了衍射的方向。衍射指标的整数性决定了衍射方向的分立性，从而在衍射图上反映出分立的衍射点或衍射线。劳埃方程和布拉格方程实质上是一样的，都是联系衍射方向和晶胞大小、形状的方程，不同点是：劳埃方程以直线点阵为出发点，布拉格方程以平面点阵为出发点，布拉格方程的应用更广泛。

劳埃群 Laue symmetry group 衍射空间中可能出现的点对称操作群。由于衍射空间总是中心对称的，32 种晶体学点群分别与对称中心组合将可推导出 11 种具有对称中心的点群，合称为劳埃（对称）群。

劳埃照相法 Laue photography 记录和测定晶体衍射效应的照相方法。实验装置由发射"白色"（连续）X 射线的光源、可以调整晶体样品使其指向不同方向的样品台和垂直于 X 射线束的平面 X 射线感光板所组成。拍摄劳埃相时，晶体固定不动，由于 X 射线波长连续变化，反射球半径（$1/\lambda$）也连续改变，使一部分倒易点阵点有机会和反射球的球面相遇而满足衍射条件。如果将晶体的某一对称轴或对称面调整到与入射 X 射线平行的方向后，再拍摄劳埃相，就能得到具有相应对称性的衍射图。用劳埃法收集衍射数据的特点是：可以检查晶体的对称性；在一张衍射图上可以得到大量的衍射点，但由于使用白色 X 射线光源，衍射图上的衍射点不易指标化。

老化试验 ageing test 塑料在使用和储存过程中，在光、热、氧、潮气和水等环境因素作用下，会逐渐变质而失去原有的性能，最终失去使用价值，这种现象称为老化。研究塑料的老化性，可以评价塑料的耐光和老化性能，确定其使用价值。现行的老化试验方法大致可分为两类，一类是自然老化试验方法，一类是人工加速老化试验方法。自然老化试验方法是利用自然环境条件进行老化的一类试验方法，它主要包括：自然气候暴露试验方法、耐光性试验方法、仓库储存试验方法等。人工加速老化试验方法是在实验室内用各种老化箱进行老化的一类试验方法。老化箱可以模拟并强化自然环境条件的某些老化因素，可以加快材料的老化进程，从而较快获得试验结果。这类方法主要包括：人工气候老化试验方法、热老化试验方法、湿热老化试验方法、盐雾试验方法等。

类质同晶化合物 isomorphous compounds 见类质同晶取代条。

类质同晶取代 isomorphous replacement 当两种化合物的分子式类型相同，而且晶体的几何形状相似，这两种化合物称为类质同晶化合物。当它们的晶格大小大致相同时，一种离子可取代晶体中的另一种离子而形成混晶，这个过程称为类质同晶取代。例如，以磷酸铵镁形式沉淀 Mg^{2+} 时，由于 K^+ 与 NH_4^+ 的大小相近，因而 K^+ 可部分取代 NH_4^+ 形成磷酸钾镁沉淀，造成沉淀的玷污。

累积频数 accumulative frequency 在一组测量值中，出现数值小于某一值的测量值的总和。以累积频数为纵坐标、测量值为横坐标的表示累积频数图，是用来表示测量值分布的一种重要方式。

棱镜的色散率 dispersion of spectral prisms 不同波长的光以同样的入射角 i_1 投射到光谱棱镜时，经棱镜两折射面连续折射后，不同波长的光将以不同的偏向角 θ 出射，因而使不同波长的混合光按波长实现空间分离，这是棱镜色散的机理。棱镜对不同波长色散能力的大小，即角色散率的定义为$\frac{d\theta}{d\lambda}$，可以推导出对于以最小偏向角状态通过棱镜的某波长 λ 的光，其角色散率既与棱镜的折射顶角 α 大小有关，也与棱镜材料本身的色散率$\frac{dn}{d\lambda}$有关。提高棱镜色散率的途径有两条：(1) 制造折射顶角 α 大的棱镜，但受到光会在第二折射面发生全内反射的限制；(2) 选用材料色散率$\frac{dn}{d\lambda}$大的光学材料制作棱镜，遗憾的是$\frac{dn}{d\lambda}$大时材料的吸收率也大、光能损失大。为了实际上达到高色散率，往往采用多块较小尺寸、较低吸收的小棱镜组合设计方案，代价是仪器结构的复杂化。

棱镜分辨率 resolution of spectral prisms 在棱镜光谱仪器中，色散棱镜是价格最昂贵的光学元件，因而希望在保证使用要求下棱镜尺寸尽可能小，所以棱镜的通光孔径是整个光学系统的孔径光阑，由它限制能通过光学系统的光束口径。在棱镜筒光孔径上发生的光衍射情况决定了棱镜光谱仪器所能达到的光谱分辨率。根据方形（长方形）光孔夫琅和费（Fraunhofer）衍射理论，可推导出对处于最小偏向角状态通过棱镜的某波长 λ 的光束，棱镜的分辨率 R。

$$R=\frac{\lambda}{\Delta\lambda}=t\cdot\frac{dn}{d\lambda}$$

式中，t 为棱镜底边的长度；$\frac{dn}{d\lambda}$为棱镜材料在 λ 附近的色散率。由此式可得到以下各点有用的推论：(1) 用同样材料制成、底边长度相等的几块棱镜，不论其折射顶角 α 大小是否相等都有相同的分辨率；(2) 用几块底边之和为 t 的小棱镜接连工作，可以获得一块底边为 t 的大棱镜同样的分辨率，这提供了采用低价小棱镜组代替价昂（甚至无法获得足够大晶体等材料）大棱镜的依据；(3) 在光学调整或使用时，若没有将足够大的光束充满棱镜有效孔径，则只有通光部分的棱镜一部分（有效底边长度减小）才起色散作用，因而不能达到全部棱镜通光时应有的分辨率。

棱镜光谱仪 prism spectrograph 它是最早出现的光谱仪，它以透明物质的折射率随波长变化的物理现象为基础。分光棱镜是棱镜光谱仪的核心，根据棱镜色散能力大小的不同，可分为大、中、小型光谱仪。根据所选用棱镜材料的不同，又可分为可见光区的玻璃棱镜光谱仪、适用于紫外

区的石英棱镜光谱仪，以及适用于远紫外区的萤石棱镜光谱仪。棱镜光谱仪主要由照明系统、准光系统、色散系统及投影系统四部分组成。

棱镜红外分光光度计 prism infrared spectrophotometer 以棱镜为色散元件的红外分光光度计。棱镜的色散能力以其角色散率 $d\theta/d\lambda$ 来表示。

$$\frac{d\theta}{d\lambda}=\frac{2\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\left(\frac{dn}{d\lambda}\right)}{\left(1-n^2\sin^2\frac{\alpha}{2}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

式中，n 为棱镜材料的折射率；α 为棱镜的顶角。CaF_2、LiF 棱镜色散率大，用于波数大于 $1800cm^{-1}$ 的短波区。而 KBr 虽可用到 $400cm^{-1}$ 的长波区，但在短波区的色散率太差。NaCl 棱镜色散性能介于上述两类棱镜之间，早期中程红外光谱仪多使用NaCl 棱镜。棱镜红外分光光度计已逐渐被淘汰。参见**棱镜色散率**条。

冷冻法 freezing way 为了解决生物样品的高放气性的特点、保持分析室的真空度以及避免电子束对样品的辐照损伤采用的对样品用液氮冷冻的方法。

冷光 cold light 同化学发光。参见**化学发光**条。

冷凝集素 cold agglutinin 是在37℃以下检测时呈最大效价凝集的抗体，常是针对红细胞的表面抗原。

冷原子非色散原子荧光光谱 cold vapor and non dispersion atomic fluorescence spectrum 是使用滤光器来分离分析线和邻近谱线的冷原子荧光光谱。这种方法可降低背景。

冷原子荧光光谱法 cold vapor atomic fluorescence spectrometry 是原子荧光光谱法的一种，也是一种痕量分析方法。通过冷蒸气法使汞原子化，并使汞原子蒸气在辐射能激发下产生的荧光发射的强度进行定量分析的荧光光谱分析法。

冷蒸气法 method of cold vapor 基于汞的独特性质，只能用于汞元素的测定。由于汞可以很容易从化合物被还原为金属，其蒸气压在 20℃ 高达 0.16Pa，因而它可以不用特殊的原子化器即可测定。原子化常用的方法是用硼氢化钾将汞还原为元素状态，用载气将汞蒸气带入低温原子化器中。

冷蒸气原子吸收光谱法 cold vapour atomic absorption spectroscopy 一种测汞的原子吸收光谱法。汞是惟一不需加热能在常温下气化的元素。通常是用还原剂将试样中的汞还原为金属汞，或者以汞齐形式富集试样中的汞，然后将汞气化，用载气导入原子吸收池进行测定。对于生物试样，有时先将汞转化为双硫腙螯合物，再将其加热分解产生汞蒸气，导入原子吸收池进行测定。

离散快速傅里叶变换 discrete fast Fourier transform; FFT 时域函数$f(t)$经傅里叶变换得到频域信号$F(\omega)$。变换过程对连续函数积分运算是从$-\infty$到$+\infty$。但实际问题中，只能取有限的 FID 信号，只在 $0<t\leqslant T$范围内有值。在计算机中计算的数据也不能是连续的，因此只能作有限的离散的傅

里叶变换。Cooley 和 Tukey 提出的算法大大加快了计算速度，故称快速傅里叶变换（FFT）。

离体活化分析 in vitro activation analysis 用中子和带电粒子照射取自活体或尸检的生物样品，使被分析元素活化变为放射性核素，经放化处理后用 γ 谱仪测量，或不经放化处理直接用高分辨率的 Ge(Li) 半导体 γ 谱仪鉴定所产生的放射性核素、测量其活度，以确定生物样品中被测元素的含量。方法的灵敏度高，能同时进行多元素测定，是临床检验、研究人体中痕量元素与疾病关系的有效手段。

离线分析 off-line analysis 需要离开生产流水线进行分析的做法，称为离线分析，属于初级的过程分析形式，需要到生产现场先取样，然后带回分析实验室去进行化验，待化验报告出来后，再送回生产线。信息严重滞后于生产过程，不能及时指导生产是离线分析的主要缺点。

离心逆流色谱 centrifugal countercurrent chromatography; CCCC 在分离过程中涉及离心力作用的逆流色谱方法。旋转小室逆流色谱和液滴逆流色谱是靠重力作用的，其缺点是洗脱速度慢。如果根据流体力学原理，使分离柱管在绕仪器中心轴公转的同时也绕自身轴线自转，就可以加速溶质在两互不混溶溶剂相的分配。新开发的高速逆流色谱仪就是采用的同步行星式的运动方式。

离心制备薄层色谱法 centric-preparation TLC 在薄层色谱和柱色谱基础上发展起来的一种旋转离心、连续洗脱的圆形薄层色谱技术，是快速分离提纯有机化合物和天然产物等的一种方法。分离效果优于制备薄层色谱法和柱色谱法，在一定程度上与制备型高效液相色谱法相似，但在节省时间和溶剂等方面优于后者，有其独特的优点。在氮气流的保护下进行分离，常用于对一些难以用常规结晶或蒸馏等分离法分离的化合物，一些不稳定的化合物，各种异构体的分离等。方法简便快速、经济、有效。

离子缔合萃取 ion-association extraction 将水溶液中的离子用相反符号的离子与之会合，使两者形成离子对或离子缔合物并萃取到有机相中的过程称为离子缔合萃取。为形成离子对或离子缔合物，常使用四烷基铵盐、四烷基磺酸盐等络阳离子鎓盐；甲基蓝、罗丹明 B 等染料离子以及 Fe(Ⅱ)，Cu(Ⅱ) 的 1,10-菲啰啉或2,2′-双吡啶等电荷小、体积大的螯合离子作为离子缔合试剂。近年来还发展了大环多元醚类试剂。萃取了离子缔合物后的有机相可用于光度分析、原子吸收分析等，可依据待测离子的不同选择高灵敏度的方法进行定量。

离子缔合配合物 ion-association complexes 亦称离子型三元配合物。三元配合物的一种。当一种配体已满足中心离子配位数的要求，但彼此间电性并未实现中和，两者间形成的是带有电荷的二元配离子，当带有相反电荷的第二种配体离子存在时，便可通过电价键结合形成离子缔合物型三

元配合物。这类配合物多属 M-B-R 型，M 为金属离子；B 为有机碱，如吡啶、喹啉、安替比林、邻二氮菲及其衍生物、二苯胍和有机染料等阳离子；R 为电负性配体，如卤素离子 X^-、SCN^-、SO_4^{2-}、ClO_4^-、HgI_4^{2-}、水杨酸、邻苯二酚等。

离子缔合物萃取 extraction of ion-association complexes 只有溶质在有机溶剂中的溶解度大于在水中的溶解度时才能实现溶剂萃取。因此，金属离子必须转变为疏水的、不带有电荷的三元混配配合物，或三元离子缔合配合物后才能被萃取入有机相。利用形成离子缔合配合物而实现萃取称离子缔合物萃取。参见**离子缔合配合物**条。

离子动能谱 ion kinetic energy spectrum；IKES 在双聚焦质谱仪，将离子流利用动能/电荷之比进行分离的质谱。可用于亚稳离子的检测。

离子对色谱法 ion pair chromatography；IPC 又称离子相互作用色谱法或流动相离子色谱法，是基于溶质（样品）离子与流动相中的离子对试剂形成电中性的离子对化合物之后，通过吸附与分配等相互作用在固定相中保留和分离的一种色谱方法。固定相是普通高效液相色谱中最常用的极性或非极性键合相。离子对色谱采用的是普通高效液相色谱的分离体系。离子对色谱在生物医药样品中离子性有机物的分析、工业样品中离子性表面活性剂以及环境与农业样品中过渡金属离子配合物的分析方面非常有用。

离子对试剂 ion pair reagent 能提供与被测离子具有相反电荷的离子（反离子），并能与被测离子形成稳定的离子对化合物的试剂。

离子对探针检测 ion-pairing probes detection 在离子对色谱中，在分离柱后将具有紫外吸收的离子对试剂加入到流动相中，与非紫外吸收的被测离子形成离子对化合物，用以检测非紫外吸收被测离子的间接光度检测法。这种具有紫外吸收的离子对试剂（通常是含芳基的季铵盐和磺酸盐）被称作离子对探针试剂，这种柱后间接光度检测法被称作离子对探针检测。

离子对形成模型 ion pair formation model 离子对色谱保留机理的一种理论模型。该模型认为溶质离子先与亲脂性（疏水性）的离子对试剂在流动相中形成中性离子对化合物，然后，中性离子对化合物吸附到固定相的非极性表面，形成可逆的吸附-解吸平衡。

离子浮选法 ion floatation method 将含待分离离子的水溶液与络合剂和表面活性剂混合反应，使之转化成能依靠气泡漂浮起来的疏水性化合物，利用通气（N_2 或空气）将其富集在溶液表面的浮渣或溢流的泡沫层中，从而实现微量组分分离和富集的方法。

离子回旋共振质量分析器 ion cyclotron resonance mass analyzer 一种利用回旋加速器原理制成的质谱仪分

析器。分析室是一个置于强磁场中的具有三对电极的立方体结构。一对收集感应像电流信号，称为接受极；一对施加射频电压，称为传输极；一对发射脉冲电子束，称为阱电极。离子被引入分析室后，在强磁场作用下被迫以很小的轨道半径作圆周运动，此时不产生可检出信号。如果在立方体的发射极加上快速扫频电压，当满足共振条件时，离子吸收射频能量，运动轨道半径增大，产生可检出信号。这种信号是一种正弦波，振幅与共振离子数目成正比。利用频率和质量的已知关系可得到质荷比。离子回旋共振分析器具有多级质谱的功能。在实际应用中，同时使用傅里叶变换技术，傅里叶变换离子回旋共振分析器具有很高的分辨率（可达100万以上）和很高的灵敏度，但仪器价格和维持费用也很高。

离子减薄 ion thinner 透射电镜中为了得到电子束透明的薄膜样品，对厚膜样品进行离子轰击，使其样品变薄。它可解决大块样品表面层薄膜的问题，但是减薄速率较低。一般样品先经过研磨到几个微米厚，然后再通过离子束减薄到合适厚度。

离子检测器 ion detector 质谱仪的一个主要组成部分，检测记录离子流强度及其质量数的装置。离子通过质谱仪的质量分析器，按不同的质荷比（m/z）分离以后，进入离子检测器进行检测。质谱仪常用的离子检测器有：照相干板；法拉第筒；电子倍增器；光电倍增器；微通道板等。

离子溅射 ion sputtering 利用离子轰击样品表面，从而使样品表面的原子发射离子和中性粒子的现象。在表面分析中，离子溅射主要通过剥离样品表面，对样品表面进行清洗以及对样品进行深度分析，是表面分析中最常用的技术之一。一般采用Ar离子束进行离子溅射。

离子交换电动色谱 ion-exchange electrokinetic chromatography 以高聚物离子为假固定相，基于溶质的疏水性和与高聚物进行离子交换能力的不同，从而产生不同的溶质迁移。

离子交换分离法 *ion-exchange separation* 通过离子交换剂与溶液中的离子发生交换反应，根据不同离子交换能力与速度不同从而在固定相中保留时间不同来进行分离的方法。通常将离子交换剂装在柱中，欲分离的溶液淋入柱后，经交换、洗涤和洗脱，即可实现富集与分离。如锂、钠、钾等性质非常相近的离子能用此法将它们逐一分开。所用的离子交换剂有无机和有机两大类，用过的有机离子交换剂可再生后继续使用。用于微量组分的富集和高纯物质的制备。

离子交换剂 ion exchanger 具有离子交换功能基团的色谱填料。其离子交换功能基团能离解出阴或阳离子。通常所说的离子交换树脂就是最常见的离子交换剂。

离子交换毛细管电色谱 ion exchange capillary electrokinetic chromatography 在以硅胶基质的离子交换剂填充的毛细管色谱柱上实施的

电色谱。

离子交换膜 ion-exchange membrane 具有离子交换功能的膜。它与球状或不规则粒状离子交换树脂具有相同的化学结构。由基膜和活性基团两大部分组成。基膜是具有立体网状结构的高分子化合物；活性基团由具有交换作用的阳（或阴）离子和与基膜相连的固定阴（或阳）离子所组成。基膜的立体网状结构的高分子骨架中存在许多网孔，这些网孔相互沟通，形成细微的、孔径迂回曲折的通道，通道的长度远大于膜的厚度。正因为细微孔径的存在，使离子有可能从膜的一侧运动到膜的另一侧。

离子交换色谱法 ion exchange chromatography；IEC 以离子交换剂（如聚苯乙烯基质离子交换树脂）作固定相，基于流动相中溶质（样品）离子和固定相表面离子交换基团之间的离子交换作用而达到溶质保留和分离的离子色谱法。分离机理除电场相互作用（离子交换）外，还常常包括非离子性吸附等次要保留作用。其固定相主要是聚苯乙烯和多孔硅胶作基质的离子交换剂。离子交换色谱法最适合无机离子的分离，是无机阴离子的最理想的分析方法。

离子交换树脂 ion-exchange resin 具有离子交换功能的一类网状结构的高分子化合物。树脂中，高分子链互相绕联，在高分子链上接有可以电离或具有自由电子对的功能基，带电荷的功能基上又结合有与功能基电荷符号相反的离子。不带电荷而仅有自由电子对功能基的树脂，可以通过电子对结合极性分子、离子和离子化合物。能离解出阳离子（如 H^+）的树脂称阳离子交换树脂；能离解出阴离子（如 Cl^-）的树脂称阴离子交换树脂。它是离子色谱中最常用的柱填料，它既不溶于酸和碱，也不溶于有机溶剂，可在宽广的 pH 范围内选择流动相。但其缺陷是溶胀性较大、不耐高压。

离子交换树脂分光光度法 ion exchange resin spectrophotometry 该方法以离子交换树脂作载体，并直接对显色树脂进行光度测定，特点是将分离、富集以及树脂相显色一步完成，方法简便且灵敏度高。有三种方法使离子交换树脂显色：(1) 离子交换树脂与显色剂一起加到样品溶液中，被测离子与显色剂（通常是络合剂）形成络合物并吸附在离子交换树脂上；(2) 将已吸附显色剂的离子交换树脂加到样品溶液中；(3) 被测离子首先从样品溶液中吸附到树脂上，然后加显色剂。一般来说，只要被测离子有很灵敏的显色剂，且形成的显色剂络合物能强烈吸附在树脂上，那么就可以用离子交换树脂比色法进行测定。灵敏度远比普通比色法高。

离子交换位置 ion exchange site 离子交换剂功能基团上可交换离子所占据的位置。样品加入之前，离子交换位置被淋洗离子平衡，样品加入后，溶质离子与淋洗离子在离子交换位置发生离子交换竞争反应。

离子交换柱 ion exchange column

填充了离子交换剂，用来分离离子性成分的色谱柱。填充阴离子交换剂的称阴离子交换柱，填充阳离子交换剂的称阳离子交换柱。离子色谱柱柱长通常在5~10cm，比普通液相色谱柱要短。柱管既可以是不锈钢管，也可以是耐压耐腐蚀的塑料管。

离子阱 ion trap 通常由一个双曲面的环形电极和上下一对端电极构成。在一定的电压和频率下，所有离子均被阱收集。改变射频电压，可使感兴趣的离子处于不稳定状态，运动幅度增大而被抛出阱外被接收与检测。用离子阱作为质量分析器，不但可以分析离子源产生的离子，而且可以把离子阱当成碰撞室，使阱内的离子碰撞活化解离，分析其碎片离子，得到子离子谱。离子阱不但体积很小，而且具有多级质谱的功能，因此得到了广泛的应用。

离子阱质谱仪 ion trap mass spectrometer; ITMS 利用离子阱作为分析器的质谱仪。目前使用最多的是由高频电场进行离子封闭的保罗阱（Paul trap）。离子阱质谱仪是一种低分辨时间串联质谱仪。可以进行多级质谱测定（通常 $n=2\sim6$）价格比其他类型串联质谱仪便宜。目前在与气质、液质联用上得到广泛的应用。

离子排斥色谱法 ion exclusion chromatography; ICE 基于溶质和固定相之间的Donnan排斥作用的离子色谱法。在固定相与流动相的界面存在一个假想的Donnan膜，游离状态的离子因受固定相表面同种电荷的排斥作用而无法穿过Donnan膜进入固定相，在空体积（排斥体积）处最先流出色谱柱。而弱离解性物质可以部分穿过Donnan膜进入固定相，离解度越低的物质越容易进入固定相，其保留值也就越大。于是，不同离解度的物质就可以通过离子排斥色谱法得以分离。在离子排斥柱上还存在体积排阻和分配作用等次要保留机理。最常用的离子排斥色谱固定相是具有较高交换容量的全磺化交联聚苯乙烯阳离子交换树脂，这种阳离子交换树脂一般不能用于阳离子的离子交换色谱分离。离子排斥色谱对于从强酸中分离弱酸，以及弱酸的相互分离是非常有用的。如果选择适当的检测方法，离子排斥色谱还可以用于氨基酸、醛及醇的分析。因为其英文名称也可写作 ion chromatography exclusion，故常以ICE作为其简写形式，以与离子交换色谱法的简写形式（IEC）相区别。

离子喷雾 ion spray; ISP 又称为气流辅助电喷雾。与电喷雾离子化的原理相同，但容许更大的溶液流量。质谱分析中，在向毛细管里输送样品溶液的同时，毛细管外层有同轴毛细管喷射高速气体，辅助带电液滴雾化。使用离子喷雾可以直接分析大流量（每分钟数百微升）的样品溶液，从而更容易和液相色谱联用。参见电喷雾电离条。

离子谱线 ion line 在光源等离子体中，不仅原子可以被激发，而且离子也可以被激发。被激发的离子与被激发的原子一样，可以发射辐射，产

生的谱线称为离子谱线。原子被电离，失去一个电子称为一次电离，失去两个电子称二次电离……。其相应产生的离子线称为一次电离离子线，二次电离离子线……。在波长前面用符号Ⅱ表示一次电离离子线，用符号Ⅲ表示二次电离离子线……。用火花发生器激发产生的离子线较多，故离子线也称为火花线。

离子气体激光器 ion gas laser 离子气体激光器是气体激光器中的一类。离子气体激光器的输出功率比原子气体激光器高，可以达到几十瓦。激光介质主要有氖、氩、氪等离子。在拉曼光谱仪中应用得最普遍的是氩离子激光器，它可以输出9种不同波长的激光，其中最强的是514.5nm（绿光）和488.0nm（蓝光）。

离子枪 ion gun 电子能谱仪中产生离子束的装置，用来清洁表面或进行深度剖面分析的刻蚀。一般可分固定束斑离子枪和扫描束离子枪两种类型。前者由于束斑大且不均匀只能用来进行样品表面的清洗，不适合进行深度分析；而后者可以聚焦并对溅射点进行扫描，离子束剥离的均匀性好，常用作深度分析。

离子强度 ionic strength 常用符号 I 表示，其定义可用下式表示

$$I=\frac{1}{2}(c_1z_1^2+c_2z_2^2+\cdots+c_nz_n^2)$$

$$=\frac{1}{2}\sum c_iz_i^2, i=1,\cdots,n$$

式中，$c_1,c_2,\cdots,c_n$ 和 $z_1,z_2,\cdots,z_n$ 分别代表溶液中各种离子的浓度和其所带电荷。根据离子强度可以从手册查出溶液中各种价数离子的活度系数，从而计算其活度。参见**活度**条。

离子散射谱 ion scattering spectroscopy；ISS 一种用离子作为探束的表面分析方法。其原理是用低能惰性气体离子与靶表面原子进行弹性碰撞，通过分析散射离子的能量分布和角分布，可得到表面单层元素组分以及表面结构的信息。由于信息来源于最表层，因此成为研究表面及表面过程的强有力的手段。

离子色谱法 ion chromatography；IC 狭义地讲，是基于离子性化合物与固定相表面离子性功能基团之间的电荷相互作用实现离子性物质分离和分析的色谱方法；广义地讲，是基于被测物的可离解性（离子性）进行分离的液相色谱方法。1975年Small发明的离子色谱是以低交换容量离子交换剂作固定相、用含有合适淋洗离子的电解质溶液作流动相使无机离子得以分离，并成功地用电导检测器连续测定流出物的电导变化。但随着色谱固定相和检测技术的发展，非离子交换剂固定相和非电导检测器也广泛用于离子性物质的分离分析。根据分离机理，离子色谱可分为离子交换色谱、离子排斥色谱、离子对色谱、离子抑制色谱和金属离子配合物色谱等几种分离模式（方式）。其中离子交换色谱是应用最广泛的离子色谱方法，是离子色谱日常分析工作的主体，通常要采用专门的离子色谱仪进行分析。离子色谱法已经广泛地用于

环境、食品、材料、工业、生物和医药等许多领域。

离子色谱仪 ion chromatograph 离子色谱分析所使用的专门仪器。它和一般的液相色谱仪的基本构造和工作原理一样，最基本的单元组件也是高压输液泵、进样器、色谱柱、检测器和数据处理系统（记录仪、积分仪或色谱工作站）。此外，还可根据需要配置流动相在线脱气装置、梯度洗脱装置、自动进样系统、流动相抑制系统、柱后反应系统和全自动控制系统等。专用离子色谱仪不同于普通液相色谱仪的主要之处是使用常规的电导检测器作为常规检测器；所用的分离柱不是液相色谱所用的吸附型或分配型柱，而是以离子交换剂作填料的分离柱，而且柱容量比通常的高效液相色谱柱小得多。另外，在离子色谱中，特别是在抑制型离子色谱中，往往用强酸性或强碱性物质作流动相，因此，仪器的流路系统对耐酸耐碱的要求更高一些。

离子束 ion beam 大量离子的集合体。在表面分析中，常利用惰性气体或稀有气体离子束作为溅射分析的激发源。束斑大小和束流密度是其主要指标。

离子束分析 ion beam analysis 利用离子束与物质的相互作用来获得有关材料的元素分布和结构分析方法的总称。通常用的离子束分析方法有：次级离子质谱或离子探针，离子散射谱（ISS），核背散射技术（RBS）及沟道和阻塞效应，离子感应脱附谱（ISD）和质子诱导X线荧光谱（PIX）等。这些分析方法的共同点是：先用一定的方法产生一束具有一定能量和只包含一种质量数的离子，使它聚焦后以高度的准直性射到物体表面，当它同材料中的原子相互作用后，可以产生有散射的离子、次级离子、原子或X射线等，用质谱或能谱分析这些离子，就可获得有关材料的组成和结构方面的信息。它已成为现代分析技术中一种极为有效的方法。

离子探针显微分析 ion probe micro analysis 微区分析的一种方法。它采用电子光学方法把惰性气体等初级离子加速并聚焦成细小的高能离子束，轰击样品表面使之激发和溅射次级离子，经过加速后进行质谱分析。离子探针大大改善了表面成分分析的功能。在分析深度、采样质量、检测灵敏度、可分析元素范围和分析时间等方面均优于电子探针，但空间分辨率不够理想。

离子淌度 ionic mobility 单位电场强度下离子移动的速率。

离子通道 ion channel 指那些可调节离子通过生物膜速度的膜受体。主要有3种类型：（1）为递质活化通道（transmitter-activated channel），如*N*-胆碱受体、*M*-胆碱受体、谷氨酸受体和GABA受体等；（2）为电压门控通道（voltage-gated channel），如钠离子通道、钙离子通道和氯离子通道等；（3）为感觉信号通道，如光信号通道、机械信号通道等。离子通道在神经信息传递、信号能量转换、肌肉

收缩偶联和内分泌生化调控等多功能中发挥重要作用。

离子通道免疫传感器 ionchannel switching immunosensor 是一种基于仿生膜的离子通道开关的超灵敏的免疫传感器。它由双层脂膜组成，下半层膜通过硫醇固定在金电极表面，上半层膜可以滑动，上半层膜中置入两个短杆菌肽离子通道并连接着抗体，这种结构在膜和电极间形成了一个离子容器。当溶液中没有敏感物存在时，在外加电压下溶液中的离子大量流过离子通道开关而导电；当溶液中有敏感物如抗原存在时，因抗体/抗原的特异结合而拉动上层膜使离子通道开关关闭，停止离子流过膜（以每秒几百万离子速率）。由此可见，仅靠被测的一个生物分子的识别作用就使之放大到可测量的电导（或电流）信号，因此它是非常的灵敏（pmol）的。已应用到血型检定，细菌、病毒、DNA、药物、抗体、蛋白质、肽和血液电解质等的检测，方法简便且稳定，将成为未来生物膜方面研究和应用的热点。

离子相互作用模型 ion interaction model 离子对色谱保留机理的一种理论模型。该模型认为在非极性固定相和极性流动相之间形成了很高的表面张力。流动相的有机组分，如有机溶剂、表面活性剂、季铵碱等，可以减小表面张力，因此，固定相对这些组分具有一定的亲和力。离子对试剂中的疏水性反离子首先吸附到非极性固定相表面的内层，与反离子结合的离子和样品离子分布在固定相表面的外层，这样一来，在固定相表面就形成了所谓的双电层。当增加流动相中反离子的浓度，由于流动相和固定相之间存在动态平衡，所以，吸附到固定相表面的离子浓度也会增加。样品离子穿过双电层的移动是电场作用力和Van-der-Waals力的函数。如果带有相反电荷的样品离子吸附到荷电的固定相表面，则主要是因为样品离子的疏水部分与非极性固定相表面之间的库仑力和处于次要地位的吸附作用的共同贡献。将一个负电荷加入到带有正电荷的双电层的内部，等于抵消了双电层内部的一个正电荷，为了重新建立电荷平衡，就会有另一个反离子吸附到固定相表面。最终，吸附在固定相表面的是带有相反电荷的两种离子。

离子相互作用色谱法 ion interaction chromatography；IIC 又称离子对色谱法或流动相离子色谱法。参见**离子对色谱法**条。

离子选择性场效应晶体管 ion-selective field-effect transistor；ISFET 能够敏感离子的微型半导体电子器件，它将离子敏感性膜直接结合在场效应晶体管的栅极位置上，用绝缘性能良好的粘胶密封，只露出离子敏感膜，并引出相应的电极导线。已发表的研究有 Na^+，K^+，Ag^+，Br^-，I^-，CN^-，Cl^-，Ca^{2+} 和 H^+ 敏感场效应晶体管。利用现代电子技术的成就制备离子或分子敏感的微型探针，把化学敏感材料沉积在微小硅片上，甚至阵

列数个敏感材料，和放大器结合，做成集成电路，成为全固态的多元微型探针，对于电分析化学、生物学和医学等的研究，特别是体内测量将具有重要意义。

离子选择性电极 ion-selective electrodes 又称离子传感器。是能对溶液中的特定离子产生选择性响应的一种电化学传感器，其电位可用 Nernst 方程式表示。可用于测定溶液中的 H^+、Na^+，K^+，Li^+、NH_4^+、Ag^+，Br^-，Cl^-，I^-、CN^-，S^{2-}，F^-，NO_3^-，Ca^{2+}，Ba^{2+}，Cd^{2+}，Cu^{2+}等离子，特别适用于进行连续监测和过程控制。

离子抑制色谱法 ion suppression chromatography；ISC 通过控制流动相 pH 值，使弱酸性或弱碱性溶质的离解得到抑制，以未离解的分子状态在固定相上分配或吸附，从而达到保留与分离的液相色谱方法。其分离机理和离子对色谱法相似，也是将溶质离子转变成中性的、具有一定疏水性的分子状态。离子抑制色谱主要用于有机弱酸、弱碱的分析，离子抑制色谱也采用通常的高效液相色谱分离体系。因为它的分析对象是具有一定离子性的有机弱酸、弱碱，所以有时在离子色谱法中也提及该方法。

离子荧光光谱法 ionic fluorescence spectrometry；IFS 一种通过测量元素离子蒸气在辐射能激发下所发射的离子荧光强度进行元素定量分析的仪器分析方法。它是原子荧光光谱法的基础上新发展起来的，具有高的灵敏度和选择性。以电感耦合等离子体为原子化器时，除了存在中性原子外，还存在大量的离子，当采用两个激光器做激发光源进行两步激发，用第一个激光将离子激发到某一能级，再用第二个激光将其激发到更高的能级，再去活化发射荧光，这样可得到双共振离子荧光（double resonance ionic fluorescence），具有很高的信噪比和更好的选择性。

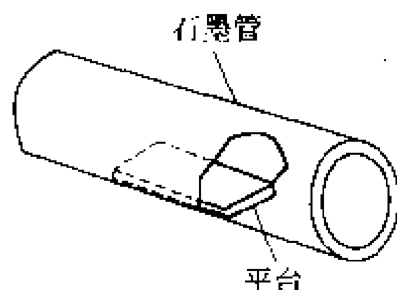
离子源 ion source 质谱分析中实现样品离子化的装置。由电离室、离子束的加速场、聚焦透镜等构成。它的作用是使被分析物电离，形成分子离子或碎片离子。离子源的种类很多，主要有电子电离源（EI）、化学电离源（CI）、热电离源（TI）、射频火花源（RFS）、电感耦合等离子体离子源（ICP）、场致电离源（FI）、场解吸电离源（FD）、快原子轰击源（FAB）、激光解吸电离源（LD）、热喷雾电离源（TS）、电喷雾电离源（ESI）等。

离子载体 ionophore 能与金属离子或亲水性有机离子形成稳定的络合物从而提高其在有机溶剂中的溶解性，或具有将离子通过生物膜、人工液膜等非极性膜进行传输的有机化合物。冠醚、穴醚等是人工离子载体，具有抗菌作用等生理活性的环状多肽、多缩酚酸肽（肽与内酯基的混合环状化合物）等是天然离子载体。如抗生素缬氨霉素是一种 36 元环的缩酚酸肽，其对 Na^+ 的选择性比 K^+ 高 10^4 倍。

离子中和谱 ion neutralization spec-

troscopy; INS 一种通过测量由稀有气体离子轰击出的俄歇电子的能量而进行分析的仪器分析方法。当以低能离子（例如 He^+, Ar^+ 等）轰击样品时，气态离子植入样品表面之中，于是有可能发生类似俄歇过程的一种自电离过程，即：有一个价轨道上的电子填充到 He^+ 离子上的空能级上，另一个电子则被电离，所得的终态离子也带有两个正电荷。INS 可以给出固体价态密度的信息，与 UPS 可做对比，用于固体表面研究，比 UPS 具有更高的表面灵敏度。

里沃夫平台 L'vov platform 在石墨炉中实现等温原子化的一种石墨盛样平台，是里沃夫（B. V. L' vov）1978 年提出的。里沃夫平台由石墨制作，通常长约 5mm，宽约 4mm，厚约 1mm。放在石墨管进样孔的正下方，试样由进样孔注入到平台上。石墨管作为电阻发热体，通电后发热升温，炽热的石墨管内壁辐射热加热石墨平台，使之受热升温。由于平台升温滞后于管壁升温，有一段时间延迟，当平台达到被测元素化合物蒸发、分解温度和被测元素的原子化温度时，管内气相温度已高于该温度，并基本达到恒定，被测元素化合物由平台蒸发进入气相，并在等温条件下实现原子化。这样可以减少以致避免已分解的分子再重新复合和凝聚而产生的分子吸收与光散射的影响，有利于消除基体干扰。使用里沃夫平台实现恒温条件下原子化，取得了很好的效果。如右图。



理论分辨率 theoretical resolution 根据瑞利准则，恰能分辨是指相等强度的两条谱线一条谱线的衍射最大强度（主最大）落在另一条谱线的第一最小强度上。理论分辨率 $R=\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$，式中，$\Delta\lambda$ 是根据瑞利准则恰能分辨的两条谱线的波长差；λ 是两条谱线的平均波长。理论分辨率与棱镜顶角、物镜的焦距无关。

理论塔板高度 height equivalent to a theoretical plate; HETP 又称理论等板高度、等板高度或板高。是指色谱柱中每一块理论塔板的高度，以 h 表示，单位是 mm。理论塔板高度与理论塔板数一样可用来表征色谱柱的效能。h 越小，柱效越高，$h=\frac{L}{n}$，式中，L 为色谱柱长度；n 为理论塔板数。

理论塔板数 number of theoretical plates 又称理论塔片数。色谱中的“塔板理论”把色谱柱描述为化工中常用的分馏塔模式，设想色谱柱是由许多块塔板组成，被分离组分在两相间达到一次平衡就相当于一块理论塔板，并以理论塔板数作为评价色谱柱效能的一个指标，用 n 表示，n 值越

大，柱效越高。理论塔板数 $n=16\left(\frac{t_R}{W}\right)^2$ 或 $n=5.54\left(\frac{t_R}{W_{\frac{1}{2}}}\right)^2$，式中，$t_R$ 是组分的保留时间；W 是基线宽度；$W_{\frac{1}{2}}$ 是半峰宽。

理想的非极化电极 ideal nonpolarized electrode 又称去极化电极。是电流通过时，电极电势不随电流的变化而变化的电极。一个具有大面积汞层的饱和甘汞电极，在通过电流较小时接近于理想的去极化电极。

理想的极化电极 ideal polarized electrode 通过无限小的电流，便引起电极电势发生很大变化的电极。

立方晶系 cubic system 对称性最高的晶系，晶体所属点群的特征对称性是：具有四个按立方体的体对角线取向的三重对称轴。立方晶系的晶胞参数之间的关系为 $a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$，选取晶胞时应使三重轴平行于晶胞的体对角线。立方晶系有三种可能的布拉维格子——立方简单格子、立方面心格子和立方体心格子。

立特罗型装置 Littrow mounting 用同一块凹球面反射镜既作准直镜，又作成像物镜。经过狭缝的光线投到凹面反射镜上，变成平行光投射到光栅上，色散后平行单色光又被反射到凹球面反射镜上，然后在焦平面上聚焦成像。平面反射镜的作用是使出射光线转折 90°，使两狭缝的机械位置离开一些。在这种装置中，所用波长的入射角等于或接近其衍射角。它的主要特征是结构紧凑、成本低。这种装置多用于单色仪中。

立特罗装置 Littrow mounting 见**自准直式平面光栅装置**条。

沥青的软化点 softening point of bitumens 在尺寸为 41mm × 20mm × 0.15mm 的薄钢片上，涂以厚度为 $0.05g \cdot cm^{-2}$ 的沥青，在降温速度为 $1℃ \cdot min^{-1}$ 并受力弯曲下，沥青涂层出现龟裂温度，以℃表示。标准测定方法按 GB 4510—84 进行，此法与 IP 80 相当。软化点表示低温下沥青适应变形的能力。

沥青的延度 ductility of bitumens 表示沥青的延展性能和柔韧程度。将沥青试样装入标准模具，在断面为 $1cm^2$，温度为 25℃ 时，以 $5cm \cdot min^{-1}$ 的速度拉伸，测量其拉断时的长度，以厘米表示。标准测定方法按 GB 4508—84，此法与 ASTM D113 相当。

沥青烟分析 asphaltum flume analysis 将玻璃纤维滤筒和冲击式吸收瓶串联，可同时采集以气溶胶状态和蒸汽状态存在的沥青烟。滤筒捕集到的沥青烟经提取、干燥后，秤重定量，并用于配制紫外分光光度法的标准溶液。以环己烷作吸收液捕集到的蒸汽态沥青烟各种成分在波长为 150～300nm 范围内有各自的特征吸收峰，可用紫外分光光度法测定。两部分含量之和即为样品中沥青烟含量。当采样体积为 500L 时，最低检出浓度为 $5.3mg \cdot m^{-3}$。测定范围为 $5.3 \sim 700\ mg \cdot m^{-3}$。

例行分析 routing analysis 又称常规分析。指一般化验室日常生产中

的分析。

隶属度 membership 隶属函数 $\mu_{\underset{\sim}{A}}(x)$的值，在模糊数学中，用来表示组成模糊集的元素 x 属于模糊集 $\underset{\sim}{A}$的程度。参见**隶属函数**条。

隶属函数 membership function 又称从属函数。是描述客观事物模糊性的特征函数，记为$\mu_{\underset{\sim}{A}}(x)$，表示组成模糊集的元素 x 属于模糊集 $\underset{\sim}{A}$ 的程度，在［0，1］区间取值。在客观世界中，许多事物的界线是模糊的，如“清洁与污染”，“高个子”，“老年人”等。以“老年人”来说，多大年龄算是老年，没有严格的界线，根据经验可用隶属函数来描述如下

$$\mu_L(x)=\frac{1}{1+\left(\frac{5}{x-50}\right)^2}$$

式中，x 是 50 岁以上的年龄。当 $x=55, \mu_L(55)=0.5, x=60, \mu_L(60)=0.8, x=70, \mu_L(70)=0.94$。就是说，55 岁的人不能算老年人，只能算“半老”，因为 55 岁的人属于老年人的程度（或资格）只有 0.5；60 岁和 70 岁的人，属于老年人的程度（或资格）分别为 0.8 和 0.94。

粒度效应 particle size effect X 射线荧光光谱分析中的一种基体效应。实验表明，对于均匀的固体粉末样品而言，样品的紧密程度相同时，粒度越小，荧光谱线的强度就越高；当粒度相同时，样品被压得越紧密，荧光谱线的强度也越高。在不均匀样品中，由于存在着各种不同的粒度或化学组成的颗粒，影响荧光谱线强度的因素就要比均匀样品复杂得多。

粒子束接口 particle beam interface 用于液相色谱-质谱（LC-MS）联用的一种接口。液相色谱洗脱液，在惰性气体混合和推动下，获得扇形喷射的雾状微小液滴，这些雾滴随即进入一个低压的、适当加热的溶剂蒸发室，在溶剂蒸发室，大部分溶剂被排走，部分溶剂和被分析物的粒子进入动量分离器，溶剂等动量小的分子被排放出去，动量大的样品粒子束被导入质谱仪，再通过电子电离（EI）或化学电离使样品离子化。与其他类型的 LC-MS 接口相比，粒子束接口的最大优点是被分析样品进入质谱仪后，可用电子电离的方法获得经典的质谱图。

连续饱和法 progressive saturation method 简称 PS 法。PFT-NMR 测量 T_1 的一种方法。脉冲序列为 $\frac{\pi}{2}-\tau$（变数）$-\frac{\pi}{2}-$采集 FID $-t_R(\geq 5T_1)$。与反转回复法相似，仅将第一个脉冲改为$\frac{\pi}{2}$脉冲，所得的信号均为正值。$M_z(\tau)$与 τ 满足

$$M_z(\tau)=M_0(1-e^{-\frac{\tau}{T_1}}),$$

用 $\ln\left(\frac{M_0-M_z(\tau)}{M_0}\right)$对 τ 作图，应呈直线。其斜率为 $-\frac{1}{T_1}$。参见**反转回复法**条。

连续波电子自旋共振 continuous-wave electron spin resonance; CW-ESR 传统的 ESR 谱仪均为连续波电子自旋共振谱仪，即在固定频率的微波连续照射下，扫描磁场检测 ESR 信号的定频扫场型 ESR。现在国际上主要使用的仍然是 CW-ESR 谱仪，但近年来，脉冲傅里叶变换 ESR 谱仪已商品化，是今后的发展方向。

连续波 NMR 谱仪 continuous wave mode NMR spectrometer 采取连续波方式获得 NMR 谱信息的仪器。分为两种方式：扫频和扫场。扫频的 NMR 谱仪是固定外加静磁场的场强，在顺次连续改变射频波的发射频率的同时，记录 NMR 谱图。此时谱图的左端出现的共振峰的频率较右端的为高，因此偏左端的区域称为高频区，而右端区域称为低频区。扫场的 NMR 谱仪是固定射频发射场的频率，在依次连续改变磁场强度的同时记录 NMR 谱图。此时谱图的左端出现的共振峰的场强低于右端的，因此偏左端的区域称为低场区而右端区域称为高场区。基于此原因在 NMR 谱图中的化学位移较大的左端区称为高频区或低场区，而化学位移较小的右端区称为低频区或高场区。连续波扫描方式 NMR 谱仪工作效率很低，已经被淘汰。

连续多路自动分析器 sequential multiple autoanalyzers; SMA 一种可连续同时测定样品中多种组分的自动分析仪器。例如，较早的 8 道自动分析器可以同时测定样品中 Na^+、K^+、Cl^-、CO_3^{2-} 和总蛋白质、白蛋白、尿素及葡萄糖，每小时可分析 20 个样品。稍后由计算机控制的 20 通道自动分析器可同时测定样品中 20 个组分，每小时可分析 150 个样品。这类自动分析仪器及其微型化是分析仪器发展的方向。

连续光谱 continuous spectrum 它是由炽热的固体和液体、高压气体、电子离子复合或激发态分子解离等发射或吸收的在一定波长范围内的连续的辐射。连续光谱没有锐线或分立的谱带。

连续光源背景校正法 continuous source method for background correction 利用连续光源校正背景的方法，是 1965 年由 S. R. Koirtyohann 提出来的。该法的基础是：原子吸收线宽度相对于光谱通带宽是很小的，在光谱通带内，连续光源在分析线波长被分析原子所吸收的光强，相对于总入射光强来说可以忽略不计。先用锐线光源测量分析线的原子吸收和背景吸收的总吸光度，再用连续光源（紫外区用氘灯或碘钨灯，可见区用氙灯）在分析线处测量背景吸收的吸光度，两次测得的吸光度相减即得到纯原子吸收的吸光度值。优点是在紫外区对吸光度小于 1 的非结构背景校正效果较好，仪器结构简单，价格便宜。不足之处是氘灯能量较弱，校正背景能力受到限制，也不能校正结构背景。且由于背景空间分布的不均匀性、使得在光谱通带内测得的平均背景与分析

波长处的真实背景有差异，由于背景的时间分布的不均匀性，使得前后两次测得的背景值有差异，且由于空心阴极灯是阴极溅射放电灯，而氘灯是气体放电灯，两光源放电性质、能量分布和光斑大小不同，调整光路平衡困难，影响背景校正效果，上述各因素将导致背景校正过度或不足。

连续流动分析 continuous flow analysis；CFA 由斯盖司（Skeggs）于1957年建立的连续流动自动分析系统，是指在液流中不间断地测量待测物浓度变化的过程。即一系列试样相继通过分析仪的同一通道，在事先选定的点加入试剂，在试样流向流通池的过程中进行混合和反应，并达到稳态，在流经流通池时连续记录测得的信号。为避免试样间的交叠，采取了引入空气泡间隔的办法。CFA技术不仅能完成试样量取、稀释、加热、混合和加试剂等操作，还可进行在线渗析、蒸馏、溶剂萃取等分离操作。CFA技术已有40余年的历史，建立了许多实用的分析方法，并在实践中不断改进和完善。因此，在许多应用领域中CFA仍很有生命力。

连续流动化学发光测量 continuous flow chemiluminescence measurement 分析物与反应试剂在检测前以稳态的连续流动混合方式进行混合并用发光检测器进行测量。与此对应的是利用静止池式的液相化学发光检测器对化学发光进行测量，即所谓静态化学发光测量。

连续流动快原子轰击接口 continuous-flow fast atom bombardment interface 用于质谱仪的小流量直接连接装置。其工作原理与快原子轰击相同，只是在进样接口上有所不同。用快原子轰击方式时，样品和基质混合，直接涂在金属靶上，用快原子轰击样品；连续流动快原子轰击接口（CFFAB）的进样口是一段毛细管，毛细管的出口处接一个网状金属片，毛细管中的液体从网状金属片上低速溢出时，均匀扩散成液膜，快原子束打在液膜上，激发出离子。金属片周围有一层滤纸，用来吸收不断溢出的基质和溶剂。也有的仪器用一片烧结的石英磨砂片代替金属片作为样品靶。CFFAB可以和低流速（$<5\mu l\cdot min^{-1}$）微柱液相色谱联用，分析一些高极性、易分解的化合物。

连续流动闪烁记数器 continuous flow scintillation counter 是一种液体闪烁记数器。可用来连续监测含有放射活性物质的专用仪器。

连续式分析器 continuous analyzers 一种连续流动式单道自动分析仪器。通常由自动进样转盘、计量泵、混合螺旋管、透析器及可适于流体检验的检测器所组成，可连续测定不同试样中相同的某种组分，改变所用试剂，即可改变测试对象。可分别用于空气中硫化物或水中磷化物、氮化物的测定以及临床项目（如尿氮）的检验。

连续X射线光谱 continuous X-ray

spectrum X 射线光谱中，强度随波长连续变化的部分，又称普通光谱、白色光谱、连续光谱或轫致光谱。在 X 射线管中，当高速运动的电子撞击作为阳极的靶材表面时，因电子的运动突然受到制止，使其周围的电磁场发生急剧变化，从而产生电磁波。由于大批电子射到阳极上的时间和条件不尽相同，每个电子减速的程度并不一致，其动能转化为光能的效率也不一样，所以产生的 X 射线具有各种不同的波长。其中波长最短的 X 射线是由那些在一次碰撞中速度就降为零的电子所产生的。

连续自动监测技术 continues automatic monitoring technology 连续自动监测包括两方面内容：一是实验室用的自动分析，指自动进样、样品处理、分析、数据显示，或将分析仪器直接连接到电子计算机上进行程序控制，从而使整批样品分析过程自动化，即单机自动化；另一是现场建立监测装置自动化的网络，即对污染源排放的废气、废水或生产中的特定目标成分，以及大气和各种水体被污染的情况进行连续自动采样、测定、传输和数据处理的实时监测体系。借助电子计算机与分析仪器联用，控制整个分析程序。并将动力标准图谱信息和标准物质的分析数据储存在计算机内，当输入复杂的未知试样的分析数据时，就可以通过计算机快速、准确地得到定性和定量的分析结果。这种对测定对象进行连续的长时间自动的监测对于环境分析监测具有十分重要的意义。连续自动监测技术又分大气和水质污染连续自动监测。

联动扫描 linked scan 在具有两个以上分析器的磁质谱仪中，根据一定方式同时扫描电场（E）和磁场（B），检测亚稳离子的相关特定离子的方法。主要的扫描方式有以下几种。（1）B/E 比值固定：由特定的先驱离子（母离子）生成子离子的检测方法，亦称为子离子；（2）E^2/V比值固定：与 B/E 联动扫描方式相同，V 是离子加速电压；（3）B^2/E比值固定：检测生成特定子离子的所有先驱离子（母离子）的方法，亦称母离子扫描（precursor ion scan）；（4）$B\ [1-(E/E_0)]^{\frac{1}{2}}/E$ 比值固定：检测丢失特定中性基团的方法，亦称为中性碎片丢失扫描。

联用技术 combined technologies 联用技术是目前分析化学的热点。在环境分析中，由于样品的复杂性，测定难度大，对信息的要求又高，用一种仪器的单项技术有时很难解决实际问题。若将两种方法和（或）仪器联用，就可以发挥两者的特长。目前主要是将高效分离的色谱技术和高灵敏的检测技术联用以减少预处理，进行多种成分的同时分析。取长补短地解决灵敏度和选择性问题，并可大大节约时间。如 GC/MS 色谱与质谱联用技术，在环境有机分析中成功应用的经验已为分析人员所熟知。三联、四联技术的应用是环境分析及环境分

析仪器发展的新动向。

联用质谱法 combined mass spectrometry 将气相色谱或液相色谱等与质谱仪连接起来作为分析装置的质谱分析法。例如，气相色谱/质谱联用（GC-MS）、液相色谱/质谱联用（LC-MS）、毛细管电泳/质谱联用（CE-MS）等。在联用质谱法中，利用气相色谱、液相色谱、毛细管电泳的高分离特性，将被分析物分开，再进入质谱仪进行检测。

良好农业措施 good agricultural practice；GAP 良好农业措施（GAP）是国际上的一种通称，也可称之为合理安全使用农药规范。由国家行政部门在农业生产各环节中，在保证使用农药有效防治病虫害的前提下，根据实际使用条件，使农产品中农药的残留量减至最小量。从毒理学角度评价为人体可接受程度，以保护人体健康和减少环境污染。所制定的合理使用农药的标准或规范条例，对各种农药及其剂型的使用剂量、浓度、次数、方法、防治病虫害类别、使用时作物生长期、收获前安全间隔期都做出明文规定。

粮食成分分析 foodstuff component analysis 粮食成分分析包括水分、粗蛋白、粗脂肪、总糖、非还原糖、还原糖、淀粉含量、粗纤维和总磷量测定等。粮食成分分析可以用化学分析法，目前常用近红外光谱方法。

粮食中水分测定 determination of water in foodstuff 水以游离水（或自由水）和结合水（或束缚水）两种形态存在。游离水加热易于分离，可根据加热干燥后剩余物质量或蒸发的水质量，计算出样品中含水量；而结合水不容易分离，结合水的测量可用卡尔·费休法。由于通常样品中水的含量范围很宽，常量水分的测定方法有：105℃恒重法、定温定时法（130℃，40 分钟法）、隧道式烘箱法（160℃，20 分钟法）、蒸馏法等。低含量水分的测量多采用仪器分析方法，如卡尔·费休仪法、电测法、中红外光谱法、近红外光谱法、气相色谱法和核磁共振法等。此外，还有微波法和化学干燥法。

粮油卫生检验 sanitation inspection of foodstuffs and oils 属于食品卫生检验的一部分，其目的是防范粮油有毒物质，保证粮油卫生质量。粮油有毒物质是指粮油在生产、管理、贮存和运输过程中被有机磷农药、无机磷化合物、金属毒物、熏蒸和消毒剂以及因保管不善使粮油生霉过程中产生的黄曲霉素 B_1 等。这些物质残留容易引起人、畜中毒。为了保证食用安全，必须对粮油进行卫生检验，尤其是用杀虫剂熏蒸后的粮油，只有通过检验才能判断有毒无毒，是否超过允许标准。

两性电解质 ampholytes 分子中同时含有正电荷和负电荷离子的电解质。参见**两性物质**条。

两性离子 zwitter-ion 随着溶液环境（pH 值）的变化，既可以阴离子形式存在，也可以阳离子形式存在的离子性化合物。如氨基酸就是一类

两性离子，它们在碱性溶液中为阴离子，在酸性溶液中则为阳离子。

两性离子交换剂 zwitterion exchanger 色谱填料的基质表面同时接入了阴离子和阳离子交换基团，或者接入的功能基团分子中本身就同时含有阴离子和阳离子两类交换基的离子交换剂。这类离子交换剂与电解质接触可形成内盐，用水淋洗又很容易再生，可用于阴阳离子的同时分离。

两性溶剂 amphoteric solvents 既能接受质子，也能给出质子的溶剂。在两性溶剂中，水、乙醇等给出和接受质子的能力基本相同，称为均等两性溶剂。液氨、二甲基甲酰胺等接受质子的能力占优势，称为亲质子（或碱性）溶剂；甲酸、乙酸等给出质子的能力占优势，则称为疏质子（或酸性）溶剂。

两性物质 amphoteric substances 根据酸碱质子理论，既能在酸碱反应中提供质子，又能在酸碱反应中接受质子的物质。例如 HCO_3^-，既能给出质子形成它的共轭碱 CO_3^{2-}，表现为酸；又能接受质子生成它的共轭酸 H_2CO_3，表现为碱。$H_2PO_4^-$，HPO_4^{2-}，H_2O，$H_2N—CH_2—COOH$ 等都是两性物质。

亮度 brightness 对一定尺寸的光源，光源表面上的单位面积在与其法线方向呈 i 角的单位立体角内发射的光通量，称为亮度。所以亮度是观测光源发光明亮程度的指标，其表达式是

$$B = \frac{dF}{(dS\cos i \cdot d\Omega)}$$

式中，dF 是发光面元 dS 在确定方向上的发光强度；$d\Omega$ 是立体角；i 为观测光源时与光源表面法线所呈的角度，这说明光源的亮度与观测方向有关。只有相当粗糙的表面发光、或强散射表面被照明时，从各方向观测时亮度才相同，这类物体被称为余弦辐射体。

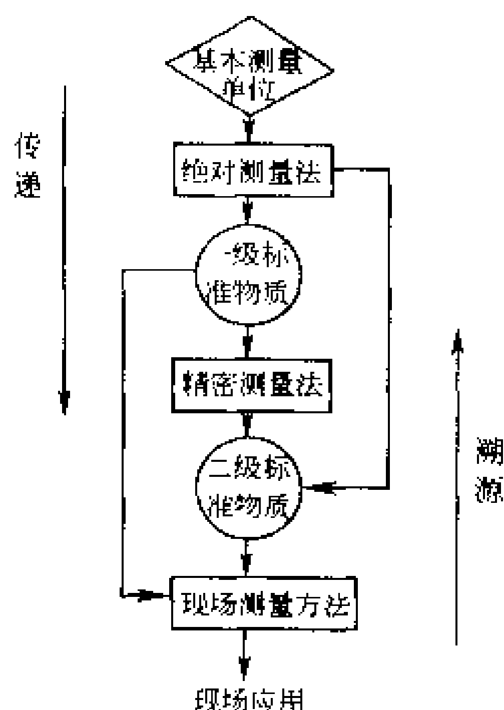
量的数值 numerical value of a quantity 量值中的数字部分。当采用不同的单位时，同一量可以具有不同的数值。1m 的距离，当采用 m 为单位，该量的数值为 1，而当采用 cm 为单位时，其数值为 100。

量热校正 calorimetric correction 通过已知材料的相变热焓值对差示扫描量热仪（DSC）进行量热的校核。目前推荐作为量热校正的标准物质有十几种，如铟、锡、铋、铅、锌、氯化铯、硫酸锂和铬酸钾等。标准物质必须是高纯的。在量热的校正中选择合适的校正材料极为重要。

量值 value of quantity 由数值与计量单位的乘积表示的特定量的大小。同一量因采用单位不同而得到不同的量值。1kg 的量，采用 g 为单位，表示为 1000g 或 10^3g；采用 mg 为单位时，表示为 1000000mg 或 10^6mg，量值本身的大小并未变化，因此，量值大小与量值的概念是有区别的。量值可以是正值、零值

或负值。

量值传递 dissemination of the value of a quantity 通过对计量器具的检定或校准，将国家基准所复现的计量单位量值通过各种等级的计量标准传递到工作计量器具。以保证用工作计量器具所测量的被测对象量值的准确一致，能够溯源到国际或国家计量基准，使不同单位对同一量的测量值具有可比性。标准物质的质量传递系统如下图所示。



钌-联吡啶配合物 ruthenium-dipyridine complex 钌-联吡啶配合物具有独特的化学稳定性、氧化还原性、激发态反应性、发光性及长的激发寿命等特性，因而备受关注。许多研究工作者以其作为光发射敏化剂和光吸收敏化剂。钌-联吡啶配合物之所以有这些性质，主要是由其分子结构所决定的。

裂解气相色谱法 pyrolysis gas chromatography; PyGC 又称热解气相色谱法。裂解气相色谱法多用于分子量大、难挥发物质的分析。方法原理是：当样品在严格控制的操作条件下迅速加热时，它遵循一定的规律裂解，得到可挥发的小分子产物，然后进入色谱柱和检测器进行分离、检测和记录谱图。每种物质的裂解色谱图都具有各自的特征性，称为指纹裂解谱图。由于裂解产物的组成和相对含量与被测物质的结构、组成有一定的对应关系，因此，指纹裂解谱图可作为定性分析的依据。

临床化学 clinical chemistry 在第二次世界大战后，20 世纪 50 年代开始较广泛地使用，其研究内容涵盖：人体在健康与疾病时的化学组分的变化，包括血液及尿中蛋白质、糖及无机物等；生物化学反应中的物理化学规律，健康与疾病状态下对生命活动过程中各种物质含量及其动态变化检测所要求的分析方法学；自动化、微量、快速简便方法与仪器，对临床实验室化学结果的数据分析统计与处理、实验室的质量控制与质量保证制度的建立等。

临床生物化学 clinical biochemistry 是化学、生物化学与临床医学相结合的一门边缘性的应用学科。它以化学、生物化学与临床医学为基础，研究人体在健康和不同疾病阶段器官、组织、体液中的化学组分、含量以及进行着的生物化学过程及其变化规律，有时也涉及药物对这些过程

的影响，为疾病的诊断、病情监测及药物疗效随访、预后判断等各方面提供信息和理论依据。

临床微生物学 clinical microbiology 亦称诊断微生物学。是在医学微生物学的范畴内，与临床医学密切结合，侧重研究感染性疾病快速、准确地检查出病原体的策略与方法，为临床诊断提供依据，并指导进一步合理用药和防止感染继续扩散的学科。

临界胶束浓度 critical micelle concentration 表面活性剂分子在低浓度时，以分子形态分散在水溶液中。当浓度超过某一最小值时，分子缔合形成胶束。表面活性剂分子开始聚集形成胶束时的浓度，成为临界胶束浓度。

临界值 critical value 在统计检验中为确定是否接受原统计假设 H_0 而确立的接受域或拒绝域的界限值。若由样本数据计算的检验统计量值大于临界值而落在拒绝区域内，表明原假设 H_0 与现有的实验数据有显著性矛盾，应拒绝原假设 H_0，接受备择假设 H_1；若由样本值计算的检验统计量值小于临界值而落入接受域内，表明原假设 H_0 与现有的实验数据没有显著性矛盾，没有理由拒绝原假设 H_0，换言之，应该接受原假设 H_0。

淋洗剂 eluent 在离子色谱分析所用流动相溶液中，能提供与溶质离子在离子交换位置进行离子交换竞争反应的淋洗离子的物质。如阴离子交换色谱分析中常用 $NaHCO_3$ 水溶液作流动相，$NaHCO_3$ 就是淋洗剂。参见淋洗离子条。

淋洗离子 eluent ion 在离子色谱流动相中，与溶质离子在离子交换位置相互竞争，将溶质离子从固定相洗脱出来的那种离子。如 $NaHCO_3$ 作为阴离子交换色谱分析的淋洗剂时，它所提供的阴离子 HCO_3^- 就是淋洗离子。

淋洗色谱法 elution chromatography 又称冲洗法或洗提法。是指将样品加于柱的一端，流动相连续通过色谱固定相，使溶质按保留从弱到强的顺序依次从固定相上洗脱出来的方法。绝大多数色谱分析采用的是淋洗法。

磷光 phosphorescence 光致发光的一种。磷光寿命长，常常可以用肉眼观察到。无机半导体可以发磷光，是由于受激电子一旦被发光中心的准稳定激发态捕获后通过热活化跃迁进行发光。这类发光的特点是，荧光与磷光具有相同的光谱，寿命大致可从 10^{-3}s 到 24h。ZnS，CaS 等蓄光性发光体既发荧光也发磷光。有机化合物的磷光是从激发三线态回到基态的禁阻跃迁所产生的发光，有机化合物的磷光光谱与荧光光谱不同，一般出现在更长波长处，寿命大致为 10^{-3} ~ 10s。分子中含有原子序数较大的原子时，由于自旋-轨道偶合使产生磷光的跃迁几率增大，有时可以观察到 10^{-6}s 以下的磷光。

磷印试验 phosphorus printing 显示钢中磷分布的一种方法。用 50g 硫代硫酸钠，1g 亚硫酸氢钾和 50ml 的

水溶液腐蚀试样，然后将未定影的溴化银相纸浸透1%盐酸水溶液，贴在试样面上10min，即可在相纸上看出磷的偏聚情况。

灵敏度 sensitivity 被测组分的量或浓度改变一个单位时分析信号的变化量。在仪器分析中，分析灵敏度直接依赖于检测器的灵敏度与仪器的放大倍数。随着灵敏度提高，噪声也随之增大，而信噪比和分析方法的检出能力不一定会改善和提高。由于灵敏度未能考虑到测量噪声的影响，因此，现在已不用灵敏度来表征分析方法的最大检出能力，而推荐用检出限来表征分析方法的最大检出能力。

灵敏度指数 sensitivity index 即桑德尔灵敏度 S(Sandell sensitivity)。以吸光度为0.001时的$\mu g\cdot cm^{-2}$数值表示分光光度法灵敏度的一种方法。其定义是：在一个截面积为$1cm^2$的液柱中，可产生0.001吸光度的有色物质的微克数。S数值越小，该法的灵敏度越高。

灵敏线 sensitive line 是指当试样中某元素的含量很少时即可出现的一些谱线，它们是各种元素谱线中最容易激发或激发电位较低的谱线。当含量逐渐减少时，这些谱线的强度也逐渐减弱，直到最后消失，其中的一条或几条最后消失的谱线称为最后线。因而一个元素的最后线就是它的最灵敏线。

零场分裂 zero field splitting 对于三重以上自旋多重态的分子或离子，由于存在着自旋间的相互作用，即使在无外磁场的情况下，自旋多重态能级的简并也会被解除，这就是零场分裂。对于有机三重态分子来说引起零场分裂的原因是电子自旋间的偶极-偶极相互作用，而对于过渡金属离子的零场分裂来说主要源于自旋-轨道相互作用，但也可能两种作用都有。

零场分裂参数 zero field splitting parameter 也叫做自旋-自旋耦合常数。对于在实验室坐标系xyz中的零场分裂张量$\boldsymbol{D}$总可以找出一主轴坐标系XYZ使其对角化。如对于三重态体系即可转化为

$$\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix} D_{XX} & 0 & 0 \\ 0 & D_{YY} & 0 \\ 0 & 0 & D_{ZZ} \end{bmatrix}$$

因$D_{XX}+D_{YY}+D_{ZZ}=0$，固对角元（即主值）可以用两个独立的常数D与E来表达为

$$D_{XX}=-\frac{1}{3}D+E$$

$$D_{YY}=-\frac{1}{3}D-E$$

$$D_{ZZ}=\frac{2}{3}D$$

或 $E=\frac{1}{2}(D_{XX}-D_{YY})$，$D=\frac{3}{2}D_{ZZ}$

通常是以D_{ZZ}表示$\boldsymbol{D}$中主值的最大者，以D_{XX}表示主值的最小者。主值或D、E值一般可从ESR谱中读出，被称为零场分裂参数。

零场分裂张量 zero field splitting tensor 对于含有两个及两个以上的

未偶电子体系，会产生零场分裂。无论零场分裂的起因是电子自旋偶极-偶极相互作用，还是自旋-轨道相互作用，零场分裂项中都含有如 S_xS_y，S_yS_z 等的项。在自旋哈密顿算符中零场分裂项都可表示为 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{S}$，其中 $\boldsymbol{D}$ 为二级对称的零场分裂张量，其迹为零，又称无迹张量。对于三重态体系零场分裂张量可表示为

$$\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix}$$

式中，$D_{ij}=D_{ji}$；$D_{xx}+D_{yy}+D_{zz}=0$。通过测试和解析单晶样品的角度依存 ESR 谱，可得到零场分裂张量在某一固定实验室坐标系中的各个张量元。

零点荷电位 potential of zero charge；PZC 又称零电荷点。电极表面净电荷为零时的电极电位。它是相对于参比电极而测得的相对值。

零量子跃迁 zero-quantum transition 见交叉弛豫条。

流变光学 rheo-optics 是流变学和光学相结合的边缘学科，它研究物质形变和流动的关系。根据观察材料宏观的性能变化（如形变等），可得到该材料的相应微观分子的结构变化的信息，建立材料宏观性能与微观结构的关系。

流程图 flow diagram；flow chart 一种以符号和关系连线表示系统各单元或分析过程中各个步骤之间相互关系的顺序图。在计算机应用中，流程图又称为程序框图，是计算机运行的简化示意图，用以指明某一特定系统的输入和输出的逻辑关系与程序执行的顺序。建立程序框图是编制详细的计算机程序的第一步。

流动池 flow cell 又称样品池。是检测器采集柱流出物信号的窗口。不同检测器的流动池的设计不同，但共同之处是要便于信号的采集，保持稳定性。

流动池技术 flow cells technique 流动池是 LC-FTIR 的定型接口，其工作原理是将流动池置于 FTIR 样品室内，一端与 HPLC 出液管相连；另一端与废液瓶相连。HPLC 分离的液相色谱馏分在流动相带动下不断流过流动池，FTIR 同步跟踪扫描与检测液相色谱馏分，实行在线联机检测。LC-FTIR 是一种非常有用的技术，如煤的衍生物分析、混合物组分分析等。

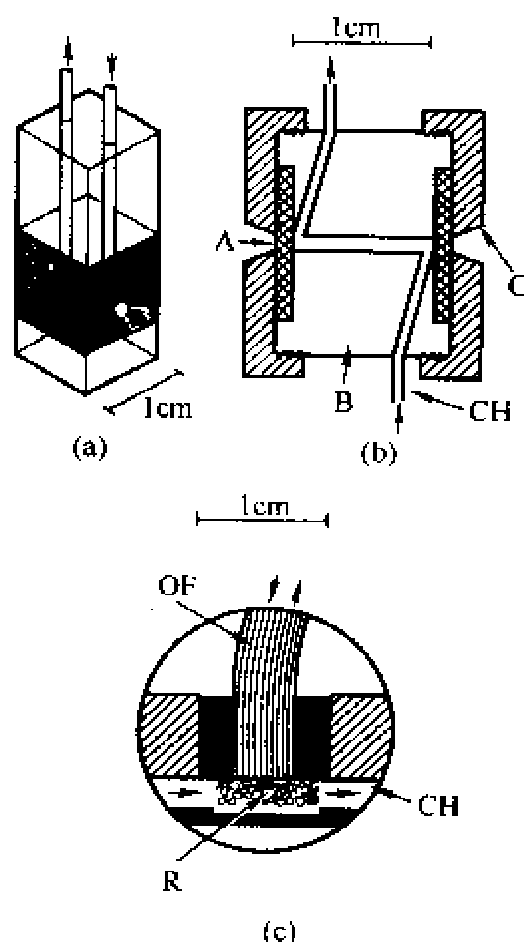
流动法 flow method 见快速流动（混合）法条。

流动分离理论 separation by flow 是凝胶色谱分离机理的一种理论模型。它把凝胶填料内的孔隙设想成由许多平行的毛细管组成，毛细管的排除效应使体积大的分子不能进入管内，而在管外，流动相流速大于管内。在能进入管内的溶质分子中，较大的溶质分子被流速场集中到管子中心而加快移动，较小的溶质分子因处于管内壁附近而降低了移动速度，其结果是溶质按分子体积大小分离。

流动分析 flow analysis 是指在流

动状态下进行化学分析的技术，但通常不包括气体流动分析和气相色谱分析。多指连续流动分析、流动注射分析和顺序注射分析等，甚至毛细管电泳、液相色谱与离子色谱等也应属于广义的流动分析的范畴。

流动吸收池 flow-through cell; flowcells 能自动或半自动完成进样和清洗的吸收池。使用这种吸收池能省去麻烦的手工操作，节省时间，可供连续分析大批样品之用，缺点是所需样品体积较大。下图是几种流动吸收池的示意图。



(a) (b) (c)

流动相 mobile phase 在色谱柱中存在着相对运动的两相，一相为固定相（参见**固定相**条），一相为流动相。流动相是指在色谱过程中载带样品（组分）向前移动的那一相。在气相色谱中，流动相是气体，称为载气（不参与分离作用，参见**载气**条）。在液相色谱中，流动相是液体，称为洗脱液或淋洗剂（参与分离作用）。流动相的作用是载带样品进入色谱柱进行分离（参与或不参与），再载带被分离组分进入检测器进行检测，最后流出色谱系统放空或收集。

流动相梯度 eluent gradient 在色谱分离过程中改变流动相的组成（溶剂极性、离子强度、pH 值等）或改变淋洗剂浓度的梯度技术。

流动注射分光光度法 flow injection-spectrophotometry 将流动注射技术与分光光度法结合，即基于被测组分选择适宜的显色反应，采用流动注射分析技术，并以带有微量流通池的分光光度计作为检测器，通过测定吸光度实现试样中被测组分的定量测定的方法。参见**流动注射分析**条。

流动注射分析 flow injection analysis; FIA 是由茹奇卡（Ruzicka）和汉森（Hansen）于 1975 年创立的。最初的定义是将一定体积的微量试样注入到一个由适当液体组成的、无间隔的连续流动着的载流中，流经化学流路，被注入的样品形成区带，并被载带到检测器中，连续记录信号变化的实验技术。它的三个要素是样品注入，可控的分散和从注入点到检测点高度重现的时间。其主要特征是非稳态测量和对浓度梯度的充分利用。主

要优点是准确度高、精密度好、分析速度快、节省试样和试剂等。FIA 发展很快，其定义也一再被突破。首先，注入物不再限于试样，可以是试剂，也可以是标准溶液，其次，注入方式也可改成计时吸入方式，此外，载液也可是样品溶液或标准溶液。相继出现的反相流动注射分析（rFIA）和顺序注射分析（SIA）都是 FIA 技术发展和进步的派生产物。

流动注射分析梯度技术 flow injection analysis gradient techniques 流动注射分析中，依靠准确控制时间来测定峰值以外的试样区浓度梯度的技术，统称为梯度技术。它包括梯度稀释、梯度校正、梯度扫描、梯度渗透等。它是基于流动注射分析中试样带属于受控分散，在管道的径向和轴向均具有连续的浓度变化截面，从而，只要在严格控制的条件下，分散的试样带任何一点都能提供确切的浓度信息。

流动注射化学发光测量 flow injection chemiluminescence measurement 流动注射和化学发光相结合对产生的化学发光进行检测，称为流动注射化学发光测量。它具有流动注射的易于自动化、重现好、分析速度快等优点，同时也具有化学发光检测灵敏高的优点。通常最简单的流动注射化学发光检测模式是，将样品导入连续流动的载液中，并与化学发光试剂混合，产生化学发光，再由检测和记录装置记录化学发光强度随时间的变化。

流动注射-可更新表面技术 flow injection-renewable surface technique 是将固体微粒作为试剂的载体而用于流动注射系统的操作与检测技术。用微珠作为一次性使用的反应表面，其主要特点是：(1)反应表面一次性使用，化学反应、吸附与解吸不必是可逆的；(2)用大量的试样接触少量载带了试剂的微珠表面，并进行反应，实现试样的预浓集，因而提高了灵敏度；(3)微珠、试剂和试样用量均小，可降低分析成本；(4)能缩短分析周期，实现实时检测；(5)易建立通用检测系统，进行各种不同的测定。该技术主要用于反应过程动力学、分子生物学、免疫学和药理学研究等，检测方式包括反射光谱、吸收光谱、表面荧光以及电化学检测等。

流动注射-原子吸收光谱仪器联用技术 flow injection-atomic absorption spectrometry 将流动注射作为进样和在线化学预处理装置的一种原子吸收光谱分析方法。1979 年沃尔夫（W. R. Wolf）和斯特华特（K. K. Stewart）首次实现了流动注射与原子吸收光谱联用。在原子吸收光谱分析中，可利用流动注射技术进行微量样品进样，在线自动稀释，在线试样处理、分离和富集，在线氢化物发生等。其优点是试样和试剂消耗量小，分析速度快，减少了基体效应，提高了测定灵敏度和精密度，使原子吸收光谱分析提高到一个新的水平。

流动注射在线进样 in-line sampling by flow injection 用流动注射技术将试样引入检测系统。1979 年沃尔夫（W. R. Wolf）和斯特华特

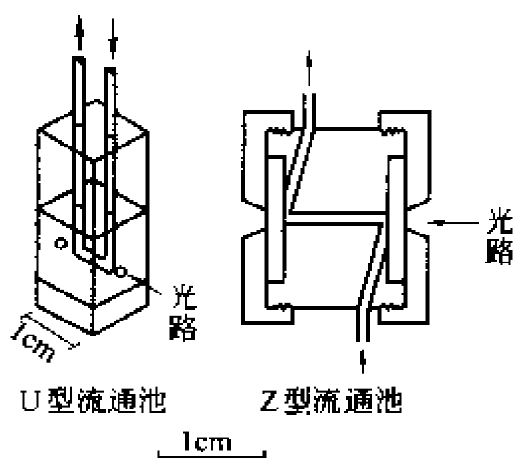
(K. K. Stewart)首次实现了流动注射与原子吸收光谱联用,将微量试样自动引入原子吸收光谱仪器进行检测。它的优点是消耗试样和试剂量小,效率高,可以使用高含盐量试液,易于实现自动化。这一进样技术已经获得了广泛的应用。

流体动力学进样 hydrostatic pressure injection 将毛细管的进样口端插入装有样品溶液的样品管中,然后使毛细管从进样口端产生一定压差并维持一段时间,这时少量样品溶液在压差作用下进入毛细管中,再将压差撤掉并把毛细管进样口端放回载体电解质溶液槽中,即可进行电泳。

流体力学屏 hydrodynamic screening 该概念适用于半稀高聚物溶液行为。聚合物单体在溶剂上产生的作用力会产生溶剂的流动场,因此可以把单体的运动形象地表示为围绕单体运动的流动场和等价的硬球。但在半稀溶液中,某单链上相距较远的单体会受到另一链上单体流动场的影响,而与同链上相距很远的单体运动不相关,产生屏效应。

流体力学体积 hydrodynamic volume 对某类高分子溶质而言,其众多分子在溶液中所占立体空间的平均体积。在凝胶色谱中,计算高分子化合物的分子尺寸时用到流体力学体积概念。

流通池 flow cell 是检测器中流通式的测量部件,由于测量原理的不同,流通池的结构也不同。如图。如用于分光光度检测的有U字型池、Z字型池和光纤反射式池等;用于化学发光检测的有T型螺旋流通池;用于电化学检测的有喷流式流通池和薄层池等。



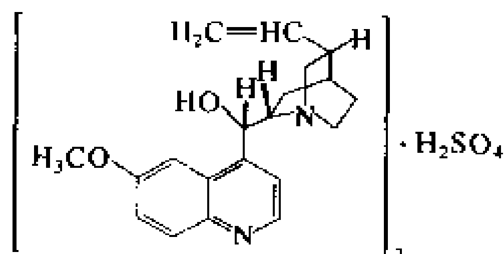
流线比色分析 on line colorimetric analysis 又称线上比色分析、在线比色分析。为测定实际生产过程中某种组分的瞬时变化,从主工艺管道上接出一支管,使料液连续地通过比色计的比色池进行测定,测量结果通过电讯号反馈到控制室仪表上,可随时掌握生产过程中该组分的变化情况。据此,可对工艺参数进行实时调整以实现最佳化生产。

流线分析 on line analysis 又称在线分析。将某些传感器直接安装在实际生产的工艺管道中以便随时测定某些参数(温度、压力、pH等)或某些组分含量的瞬时变化。测量结果通过电讯号、或光(光导纤维)讯号反馈到控制室仪表上,以便对工艺参数进行实时调整。

流型扩散 dispersion due to flow profile 又称动态扩散或流体动力学扩散。是指溶质分子在色谱柱截面方向上由于载气流速不均匀引起的扩散

效应。它使色谱峰区域展宽。这种由于载气流速不均匀导致溶质浓度在截面方向有所差别引起的扩散效应，在大管径的制备色谱柱及高载气线速时尤为严重。

硫酸喹宁 quinine sulfate 分子式 $(C_{20}H_{24}N_2O_2)_2 \cdot H_2SO_4$，结构式如下图。常用作测定荧光量子产率时的标准物质。其在 $0.5mol \cdot L^{-1}$ 的硫酸溶液中的量子产率为0.546。奎宁为金鸡纳皮中存在的一种生物碱，常用作疟疾的治疗药，是一种解热剂。



硫印试验 sulphur print test 亦称硫印检验法（sulphur printing）或鲍曼试验（Bauman test）。是一种宏观的检验钢中硫化物分布状况的试验方法，其原理是：使钢中硫化物与硫酸反应生成硫化氢，后者再与相纸上的溴化银反应生成硫化银，使相纸变成棕色。将照相纸在3%的硫酸水溶液中浸5min左右，取出甩掉所沾的多余酸液，紧贴在制好的宏观钢磨面上1～2min，即可在相纸上显出钢磨面上硫化物的分布状况。

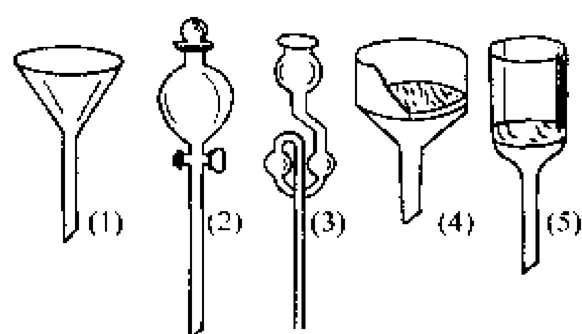
馏程 distillation range 液体混合物的初馏（沸）点与终馏（沸）点之间的范围。是表征产品质量的一种指标。纯粹物质沸点不变，只有两组分以上的液体混合物才有馏程。混合物各组分的沸点差别愈大，馏程也愈宽。例如汽油的馏程是40～200℃。

馏分收集器 fraction collector 馏分收集仪是液相色谱仪和气相色谱仪的辅助装置，主要用于制备和富集纯组分。当需要提供标准纯样或对某组分作进一步鉴定时，常常用馏分收集器在色谱柱出口处收集所需组分，除去馏分中的流动相即得到纯组分。收集器可按色谱峰流出的信号，以手工或自动控制方式进行切割。在气相色谱中，由于组分沸点较低，可采用溶剂吸收或冷阱等方法收集馏分。

六方晶系 hexagonal system 一种中级晶系，晶体所属点群的特征对称性是：在一个方向上具有六重对称轴。六方晶系的晶胞参数之间的关系为 $a = b \neq c$，$\alpha = \beta = 90°$，$\gamma = 120°$，选取晶胞时应使六重轴平行于 c 轴。六方晶系只有一种可能的布拉维格子——六方简单格子。

六甲基二硅醚 hexamethyl disiloxane; HMDSO 结构式为 $(CH_3)_3Si—O—Si(CH_3)_3$，沸点高于100℃。当不便采用TMS作为基准物时，如高温体系，可采用HMDSO为化学位移基准物，它的 δ (^1H) 值为0.055。

漏斗 funnel 分析实验中用于过滤、分离或灌注液体时的一类仪器。常由玻璃制成。根据不同需要分为：(1) 过滤漏斗；(2) 分液漏斗；(3) 安全漏斗；(4) 布氏漏斗；(5) 砂芯漏斗等等。如下图所示。



卤代烃的监测方法 halogenated hydrocarbon monitoring methods 挥发性卤代烃是指三卤甲烷（即三氯甲烷、一溴二氯甲烷、二溴一氯甲烷及三溴甲烷）及四氯化碳等。这些化合物沸点较低，易挥发，微溶于水，易溶于醇、苯、醚及石油醚等有机溶剂。一般采用顶空气相色谱法测定。即将水样置于有一定液上空间的密闭容器中，水中挥发性组分就会向容器的液上空间挥发，产生蒸汽压。在一定条件下，组分在气液两相达成热力学动态平衡（组分分压服从拉乌尔定律）。取气相样品用带有电子捕获检测器（ECD）的气相色谱仪进行分析，外标法定量，可得组分在水样中的含量。方法适用于江、河、湖等地表水及自来水中沸点低于150℃的挥发性卤代烃的测定。

卤化物压片法 pressed halide disk technique 氯化钾、溴化钾和碘化钾等压片法的统称，是红外光谱分析固体样品应用最广的方法之一。将氯化钾或溴化钾或碘化钾固体样品混合研磨，研细后的样品置于模具中用50～100MPa的油压机压成透明的片状试样，即可进行红外扫描。因溴化钾与大多数有机化合物的折射率相近，在400～4000cm^{-1}间不产生红外吸收，这样可以减少光散射造成的能量损失，并能绘制全波段光谱图，故应用最广。但缺点是制得的溴化钾片极易吸收空气中的水分，在3300 cm^{-1}附近总有或多或少的吸收，干扰对—OH或—NH基团的确认。

鲁金毛细管 Luggin capillary 作为电解池辅助结构的有参比电极的连液管。

鲁米诺 luminol 酰肼类化学发光试剂。它是国内最早商品化的化学发光试剂，它具有量子产率高、水溶液稳定、能被多种氧化物直接氧化发光和被众多的金属离子催化发光。鲁米诺化学发光反应的发光体是激发态的3-氨基邻苯二甲酸根离子，发射波长为425nm。

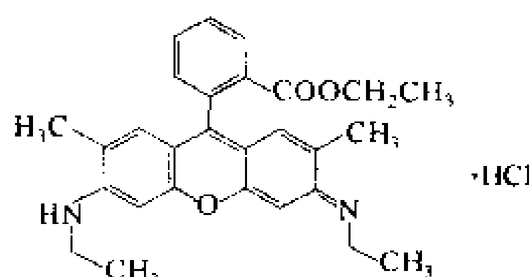
路易斯络合物 Lewis complex 由非共用电子对的授、受所形成的络合物。如过渡金属离子与配位体通过配位作用所形成的络合物可以看成路易斯酸、碱反应所形成的盐，即路易斯络合物。许多电荷转移络合物同时也是路易斯络合物。主客体反应、超分子的形成往往涉及路易斯络合物的形成。

吕氏美蓝染色液 Loeffler's methylene blue stain 一种常用的单染色溶液，用美蓝酒精饱和液与氢氧化钾溶液混合而成。亦可用作萋-纳抗酸染色的复染液。本染液处理的细菌及细胞形态清晰易于观察。

绿色食品 green food 系无污染的安全、优质、营养类食品的统称。

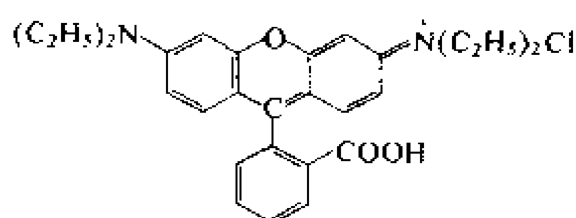
由于与环境保护有关的事物通常都冠之以"绿色"，为了更加突出这类食品出自良好的生态环境，因此定名为绿色食品。中国绿色食品分为AA级和A级。AA级指在生态环境质量符合规定标准的产地，生产过程中不使用任何有害的化学物质，按特定的生产操作规程生产、加工，产品质量及包装经检测、检查符合特定标准，并经专门机构认定的产品。A级指在生态环境质量符合规定标准的产地，生产过程中允许限量使用限定的化学合成物质，按特定的生产操作规程生产、加工、产品质量及包装经检测、检查符合特定包装并经专门机构认定许可的产品。

罗丹明6G rhodamine 6G 一种有机染料，它的结构式是



用罗丹明6G这种染料作激活介质，乙醇为溶剂，当浓度为$1.2\times10^{-3}mol\cdot L^{-1}$时，该染料激光器可输出波长在565～600nm之间的可调谐激光。罗丹明6G是共振拉曼光谱研究中常用的染料激光器工作介质之一。

罗丹明B Rhodamine B 分子式$C_{28}H_{31}ClN_2O_3$，具有独特鲜红色的一种碱性染料，是氧杂蒽染料的一种，为具有绿色金属光泽的结晶。由两分子N,N-二乙基-间氨基酚与一分子无水邻苯二甲酸在氯化锌存在下缩合得到。用于棉织品、人造丝、纸、杂物的染色。以N-乙基间氨基酚为缩合剂缩合得到乙基酯产物，该红色碱性染料是罗丹明6GCP，是一种代表性激光染料。罗丹明B在分析化学中用作金属比色分析以及荧光分析用试剂，盐酸酸性条件下与锑（V）、铊（Ⅲ）、金（Ⅲ）、镓（Ⅲ）等形成可被有机溶剂萃取的红紫色络合物。其特有的荧光也用于这些金属的定量分析。如图为其共轭结构的一种。



罗兰型装置 Rowland mounting 在该装置中，照相板盒置于罗兰圆上光栅法线的附近，在此处由于$\cos\beta\approx1$，因此具有线性色散。为了改变在光栅法线上衍射光的波长，即改变照相感光板上波长范围，需使光栅和照相暗盒分别沿着以狭缝中心为原点的直角坐标系的Y轴和X轴移动并始终保持光栅，暗盒在罗兰圆上距离为光栅曲率半径，这样，当入射角改变时，始终使照相暗盒中心处于光栅法线上，以便摄取不同波长段的光谱。罗兰型装置像色散小，并因用的是光栅法线方向的衍射，故摄得的是匀排光谱。这样装置可测定光谱的波长。此装置的优点是光源及狭缝照

明系统可以固定安装在狭缝前的仪器底座上。缺点是光谱的角宽度小，一次摄谱波段范围窄，像色散较严重难以利用高级次的谱线。如罗兰圆装置在光电直读光谱仪应用时，将出射缝装在罗兰圆上，在出射狭缝后安装光电倍增管，可一一检测。凹面光栅不需借助成像系统形成光谱，因此它不存在色差，由于减少了光学部件，而使得光吸收和反射也大大减小。

罗兰圆装置 mounting of Rowland circle 使用凹面衍射光栅作为光谱仪色散元件时，不但能使光色散而且还可使色散后的各种波长色光会聚成像。根据光学理论可建立凹面光栅聚焦方程，其一个解为：$r=\rho\cos i$ 和 $r'=\rho\cos\beta$，这是一个极坐标直径为 ρ 的圆方程，r 是入射狭缝上发光点在子午面上的投影点到凹面光栅顶点之距离，r' 是谱线上相应点在子午面上投影点到凹面光栅顶点之距离，i 是光线入射角，β 是衍射角。这个圆被称为罗兰圆：只要将入射狭缝、凹面光栅顶点（中心点）放在直径等于凹球面光栅半径 ρ 的圆周上，则从狭缝上一点发出的光束经凹面光栅衍射、汇聚后一定聚焦在同一圆周上某一点；不同波长的光虽然衍射角 β 不等，但也都被聚焦在同一圆周上不同的相应点上。按照罗兰圆布置的光谱系统，称为罗兰圆装置。采用罗兰圆装置的摄谱仪可在贴在罗兰圆周上的光谱底版上拍下清晰的光谱，但其最大缺点是当改变拍摄波段范围时，凹面光栅和底版盒都要绕自己中心转动并还得向一定方向移动，机械设计和使用都麻烦。

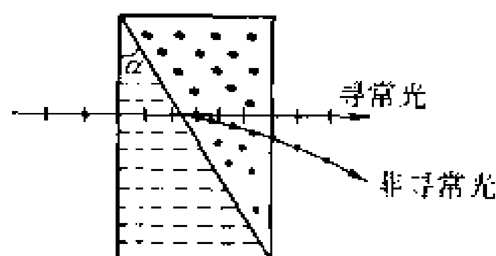
罗马金-赛伯公式 Lomakin-Schiebe formula 进行光谱定量分析时，根据被测试样光谱中欲测元素的谱线强度来确定元素浓度。元素的谱线强度 I 与该元素在试样中浓度 c 的相互关系，可表示为：$I=Ac^b$，这个公式称为罗马金-赛伯公式，是光谱定量分析依据的基本公式。式中 A 及 b 是两个常数。常数 A 是与试样的蒸发、激发过程和试样组成等有关的一个参数；常数 b 称为自吸系数，它的数值与谱线的自吸收有关。所以只有控制在一定的条件下，在一定的待测元素含量的范围内，A 和 b 才是常数。取对数得光谱定量分析的基本关系式 $\lg I=b\lg c+\lg A$。

罗舍-果德勒法 Roese-Gottieb method 一种测定乳与乳制品中脂肪的方法。将样品放入特制的抽脂瓶中，在特定的实验条件下，加入乙醚提取脂肪，测定醚层体积和醚层中脂肪质量，换算出样品中脂肪的含量。

罗什那德常数 Rohrschneider's constant 罗什那德（Rohrschneider）选择角鲨烷为标准非极性固定液，在100℃柱温下，分别测试了苯、乙醇、甲乙醇、硝基甲烷和吡啶五种化合物在某种固定液和角鲨烷两种固定相上保留指数的差值（ΔI），并以此差值的总和定义为罗什那德常数，以此常数作为对该种固定液极性的表征。

罗匈棱镜 Rochon prism 一种能将自然光分为振动面相互垂直的两束

线偏振光的器件，由两个光轴相互垂直的直角形石英棱镜沿斜边粘结而成，如下图。在塞曼原子吸收光谱仪器中用作起偏器。起偏器将来自空心阴极光源发射的共振线变为线偏振光，且限制其偏振方向只取两个：平行于磁场的线偏振光 $P_{//}$ 和垂直于磁场的线偏振光 $P_{\perp}$。$P_{//}$ 与经磁场分裂的吸收线的 π 组分波长和偏振方向相同，为吸收线 π 组分和背景吸收；$P_{\perp}$ 与经磁场分裂的吸收线的 π 组分的波长相同，但偏振方向不同，不为 π 组分吸收，仍为背景吸收。两次测得的吸光度之差，便扣除了背景吸收。



罗紫-哥特里法 Rose-Gottlieb method 一种测定乳及乳制品中脂类的国际标准方法。利用氨-乙醇溶液破坏乳的胶体性状，使非脂成分溶解于氨-乙醇溶液，用乙醚-石油醚提取游离出来的脂肪，蒸去溶剂后得粗脂肪含量。此方法适用于液状乳及部分碱溶性乳制品的脂肪含量测定。

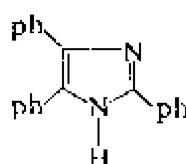
螺旋传动注射泵 screw-driven syringe pump 通过螺杆传动机构推动柱塞输送液体的一种高压泵。它相当于一个大的注射器，活塞相当于注射器的芯，活塞的推进采用螺旋传动。它的缸体积较大，通常为数百毫升。它一次吸满溶液后，活塞以恒定的速度慢慢地向里推进，溶液以恒定的速度吐出，这个过程不产生脉冲。活塞缸中的溶液吐完后，活塞回到原来的位置，再次吸入流动相，这种复原的速度可以比恒速推进时的速度快。这种高压泵输液时的流量由活塞的移动速度决定，其特点是能以恒定流量输送流动相，而与操作压力无关。在活塞复原时的短时间内，输液量会发生变化，从而产生脉冲，解决的办法是在泵出口处安装细管缓冲。如果使用两台这样的泵，可以进行梯度洗脱操作。该泵的缺点是体积大，更换流动相不方便。现在的液相色谱仪已很少采用这种泵。

螺旋轴 screw axis 进行螺旋对称操作的对称元素。螺旋对称操作是绕轴旋转操作与沿轴平移操作的复合对称操作，在晶体学中各种螺旋对称轴的旋转前进方向均应遵守“右手螺旋”定则。每一种螺旋轴的性质是由它的轴次 n 和沿轴的平移基本矢量 R 来决定的。如果沿轴方向的点阵基本周期是用矢量 t 来表示，那么，各种螺旋轴的沿轴平移基本矢量可以表示为 $R=\frac{mt}{n}$，这里 m 是小于 n 的整数。国际符号是以 n_m 来表示各种螺旋轴的，如 2_1、3_2、6_2 等。

裸银电极 silver electrode 用金属银作基体材料制成的电极。它常用作指示电极，如将银电极插入含有银离子的溶液中，或者放在含有氯离子、硫离子的溶液中均可产生电极响应。

洛粉碱 lophine 一种含氮的化学

发光试剂。化学名称为2,4,5-三苯基咪唑，它在氢氧化钾-乙醇介质中，当混进空气时可观察到长寿命的黄光。发射波长为500nm。洛粉碱在经典的有机化学发光试剂中可能是文献上记载最早的一个化合物，但在分析化学中的应用却不像后来发现的鲁米诺和光泽精那样广泛。



洛伦兹变宽 Lorentz broadening 分析原子与气体中的局外粒子（原子、离子和分子等）相互碰撞引起的谱线变宽。碰撞效应对气体中的所有受激原子是相同的，按一定比例引起吸收值的减小，是一种均匀变宽。洛伦兹（H. A. Lorentz）认为，在碰撞的瞬间使辐射过程中断，导致激发态原子寿命缩短，引起谱线变宽。洛伦兹变宽效应的大小，直接正比于每个原子在单位时间内碰撞次数。洛伦兹效应既引起谱线变宽，也同时引起谱线轮廓非对称化和分布极大的红移。所谓非对称化是用谱线红端的一半对谱线紫端的一半的比值来量度。洛伦兹变宽效应大小，不仅随局外气体压力增大而增大，而且也随气体性质的不同而不同。当吸收介质内局外气体的浓度高时，洛伦兹变宽与多普勒变宽是同一数量级。

洛伦兹到高斯线型变换滤波 Lorentz-Gauss shape transformation filter 将指数衰减的自由感应衰减（FID）信号乘上该变换滤函数$g(t)=\exp\left(\frac{t}{T_2}\right)\cdot\exp\left(\frac{-t^2}{T_C^2}\right)$。经FT后取实部，所得谱线的半高宽为$\Delta\nu_{1/2}=\frac{1.67}{\pi T_C}$。$T_C$大、线变窄、分辨率提高。优点是指数滤波仍保持洛伦兹型，无截断影响；既可缩短取样时间，又避免了截断引起的信号失真，得到较好的灵敏度和分辨率；在不能分辨多重峰的情况下，时域信号的衰减更接近于高斯衰减，更接近于匹配滤波，得到好的灵敏度；能将指数衰减信号变成伪回波形信号。

洛伦兹线型 Lorentzian line shape 见NMR **谱线型**条、ESR **谱线型**条。

洛伦兹因子 Lorentz factor 在晶体结构测定中，将实测的衍射强度数据还原为结构振幅时需要使用的一种校正因子。在衍射数据的收集过程中，对应于不同衍射的倒易点阵点与反球面相交时到旋转轴的距离若不同，则通过反射球面的线速度也会不同，洛伦兹因子被用于校正这些差异对衍射强度所产生的影响。洛伦兹因子只取决于实验装置的几何配置，与X射线的波长无关。在《International Tables for X-ray Crystallography》Vol. Ⅱ中可以查到对应于各种不同实验装置的洛伦兹因子。

络合效应 complexation effect 亦称配位效应。金属离子M与某种试剂发生反应（络合、氧化还原和沉淀反应）时，如有另一络合剂L存在，而L亦能与M形成络合物，则M与

该试剂的反应（此时称主反应）将受到L与M反应（此时称副反应）的影响。这种由于其他络合剂存在使金属离子参加主反应能力降低的现象，称为络合效应。

络合效应系数 coefficient of complexation effect 亦称配位效应系数。指络合剂L引起副反应时（参见络合效应条）的副反应系数，用$\alpha_{M(L)}$表示。$\alpha_{M(L)}$可用下式计算

$$\alpha_{M(L)} = 1 + \beta_1[L] + \beta_2[L]^2 + \cdots + \beta_i[L]^i + \cdots + \beta_n[L]^n$$

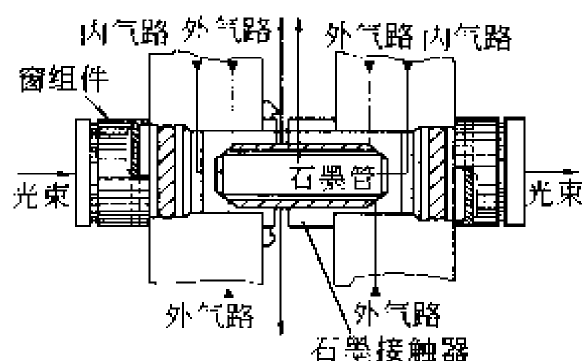
式中，[L]为络合剂L的平衡浓度；$\beta_i(i = 1,2,\cdots,n)$为M与L形成的$i$级络合物的累积形成常数。

M

马尿酸实验 hippuric acid test 口服或静脉注射苯甲酸钠后，在肝内与ATP及辅酶A（COA）反应生成苯甲酰COA，进而与甘氨酸结合生成马尿酸。可由尿中马尿酸含量判断肝脏的生物转化功能。

马斯曼高温炉 Massmann high-temperature furnace 一种电热管式高温原子化器。1968年由马斯曼（H. Massmann）提出。商品仪器中采用的马斯曼型高温炉的结构如下页图所示。它由加热电源、保护气控制系统和石墨管式炉组成。石墨管夹在固定于水冷钢架上的两个石墨锥之间，加热电源通过石墨锥向石墨管供给大电流，石墨管作为电阻发热体，发热升温，最高温度可达3000℃，使盛于管内的试样干燥、灰化和原子化。石墨管原子化器内外气路通氩气，由控制系统控制使其沿石墨管内、外流过。沿管外壁流过的氩气，保护石墨管在加热过程中不被烧蚀，内气路的氩气在石墨管内由管两端流向管中央，并由管中心的小孔流出的氩气，以有效地除去在试样干燥和灰化过程中产生的基体蒸气，同时保护已原子化了的原子不重新被氧化。在原子化阶段，控制系统自动切断内气流，停止通氩气，避免原子蒸气受到稀释和延长原子在石墨管内的平均停留时

间，以提高原子吸收信号强度。石墨炉用水冷箱通水冷却。马斯曼型高温炉存在着时间和空间的不等温特性，这是造成基体干扰的重要原因。



迈克尔逊干涉仪 Michelson interferometer 是现代傅里叶变换光谱仪中最常用的核心系统。迈克尔逊干涉仪由两块互相垂直放置的固定（定镜）和可移动（动镜）的平面反射镜和位于两反射镜法线相交处呈45°角放置的半透明半反射镜（分束镜）构成。平行光束投向分束镜上被一半反射一半透射，分别投向定镜和动镜并在它们表面反射逆向返回分束镜，再次被分束镜反射和透射的两个光束发生重叠，在重叠区形成双光束干涉条纹。干涉条纹的形成由定镜、动镜之间的相对位置所决定的光程差决定，适当匀速地沿光轴平行移动动镜，光程差随之发生变化，光束重叠后形成的干涉条纹也发生移动。迈克尔逊干涉仪最初是用于微小位移精密测定的，在傅里叶变换光谱仪中则完成光束干涉调制作用，将入射光谱信息调制成相应的干涉信息再经傅里叶逆变换运算后准确获取光谱信息，具有多通道检测、高信噪比、快速准确等一系列优点。

麦克雷诺常数 MacReynold's constant 定量描述固定液极性的参数。麦氏曾选择了十种典型化合物（苯、正丁醇、2-戊酮、硝基丙烷、吡啶、2-甲基-2-戊醇、碘丁烷、2-辛炔、二氧六环和顺八氢化茚），在120℃柱温下，分别测定了在226种固定液与标准非极性异三十烷固定液上保留指数的差值，以前五种化合物保留指数差值的总和定义为麦克雷诺常数，并以此常数来表征固定液的极性。目前，麦克雷诺常数使用比较普遍，其原因可能是所选化合物的沸点适中，测量比较方便。

麦氏重排 Mclafferty rearrangement Mclatterty 对质谱分析中离子的重排反应提出了经验规则。在质谱中，位于含有杂原子双键的 γ-位氢原子，通过六元过渡态转移到杂原子上的过程称之为麦氏重排。经过麦氏重排后常发生在双键基团 α、β 位之间的键裂解。

90°脉冲 90° pulse 见脉冲倾倒角条。

180°脉冲 180° pulse 见脉冲倾倒角条。

脉冲持续时间 pulse duration 在脉冲极谱、示差脉冲极谱、Kalousek 极谱法和其他类似的方法中，激发信号偏离基线的时间间隔称为脉冲持续时间。

脉冲伏安法 pulse voltammetry 在线性扫描或阶梯扫描电压上（通常为慢扫描）叠加一个方形脉冲电

压，测量电解池中极化电极上由于脉冲电压所产生的法拉第脉冲电流与直流电位关系的方法。该法广泛用于痕量物质的分析和电极过程（如可逆性和吸附性）的研究。

脉冲傅里叶变换核磁共振谱 pulse Fourier transform nuclear magnetic resonance spectroscopy; PFT-NMR spectroscopy 用射频脉冲射向被测试样，使其中被测的核素同时激发而产生共振吸收。脉冲一停止作用，受激核因弛豫作用而逐渐返回其各自基态，由计算机记录信号强度随时间而减弱的过程，获得时间域的自由感应衰减（FID）信号。它包含了各种共振频率核的共振信息。利用傅里叶变换可将时间域的 FID 信息转变为频率域的，得到信号强度对频率关系的谱图。将脉冲技术与傅里叶变换手段结合起来获取核磁共振谱，称作为脉冲傅里叶变换核磁共振。它显著的特点是快速，能获取用连续波方法记谱不能获得的许多有用的 NMR 信息。

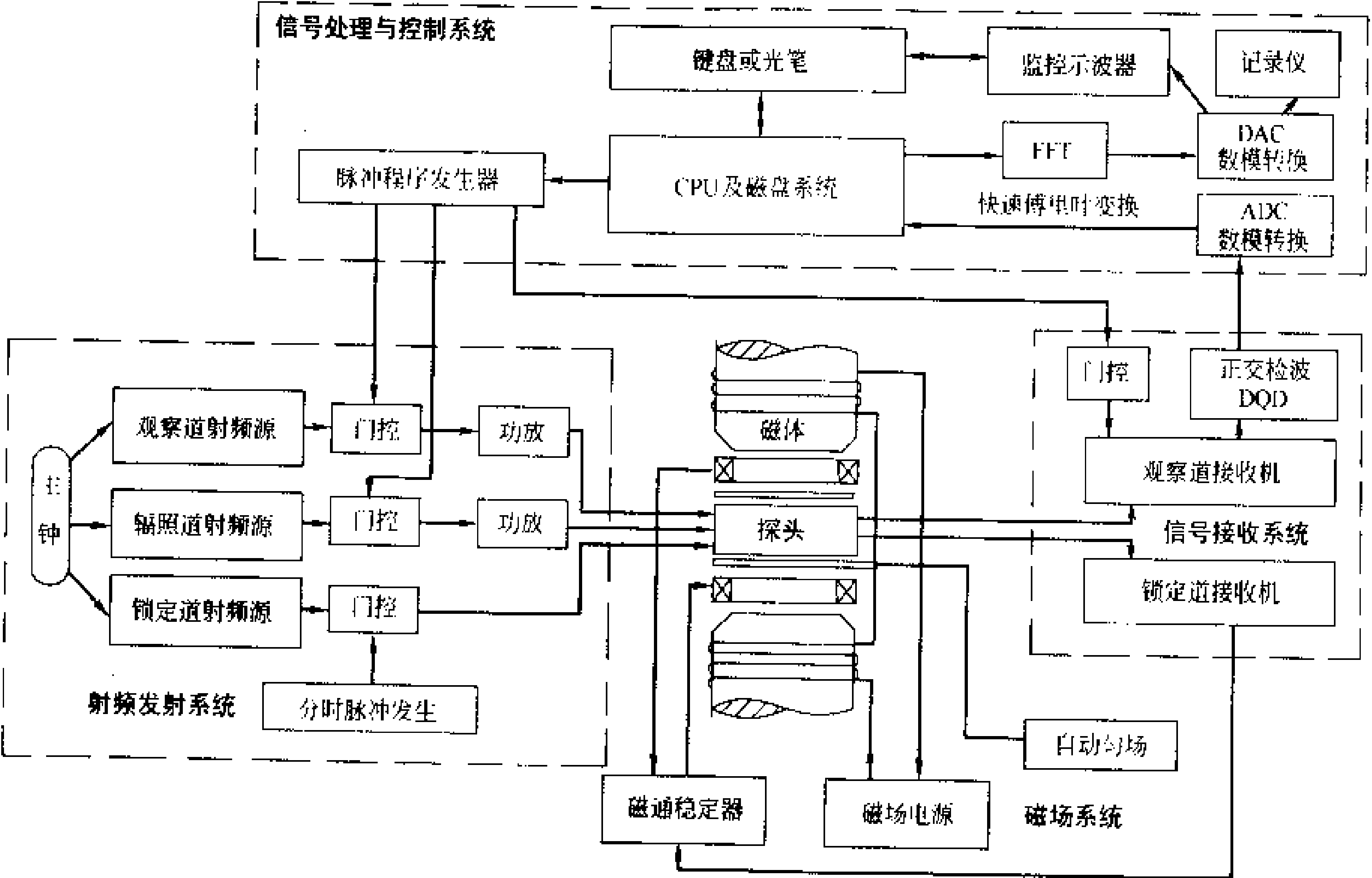
脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪 pulse Fourier transform nuclear magnetic resonance spectrometer; PFT-NMR spectrometer 利用脉冲及傅里叶变换技术检测试样的核磁共振信息的仪器。脉冲傅里叶变换核磁共振仪一般包括 5 个主要部分：射频发射系统、探头、磁场系统、信号接收系统和信号处理与控制系统，如下页图所示。

脉冲高度分析器 pulse height analyzer; PHA 对检测器的输出信号脉冲的幅度进行甄别的电子设备，又称脉冲幅度分析器。脉冲高度分析器由上甄别器、下甄别器、反符合电路及阴极输出器组成，选择适当的基线电位和窗宽，可以使一定幅度的脉冲通过，由定标器或计数率计记录其结果。在晶体色散中，脉冲高度分析器可以消除高级衍射线的干扰。在能量色散中，脉冲高度分析器可以分别测定不同波长特征谱线的强度或绘出能谱图。

脉冲光热偏转光谱 pulse photothermal deflection spectrum 采用脉冲激光器输出的脉冲激光作加热束，加热束在样品内或与样品相邻介质中产生折射梯度分布，使通过其中的探测束传播方向偏转，产生光热偏转效应。测量这种光热偏转效应所得到光谱称为脉冲光热偏转光谱。

脉冲后延迟时间 delayed time after pulse 脉冲傅里叶变换 NMR 的脉冲序列中的一个重要参数。它指在经一次激发脉冲或一个组合激发脉冲并随即采集自由感应衰减（FID）信号之后应使体系恢复到某稳定初态所需要的时间间隔，是序列中为下一次射频激发脉冲做准备的时间。它的设定与被测试样中纵向弛豫时间最长的基团的弛豫时间直接有关。设置过短则累加后所得到的信号可能得不到增强，有的谱峰会丢失，而设置过长则浪费机时。

脉冲辉光放电 impulse glow discharge 一种低压气体放电现象。在一个玻璃管内，封入一对电极（如平板电极），充入低压气体（一般为



脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪示意图

惰性气体），构成一个放电管。在两极间施加足够高的电压后，由于电子、离子在两极间的运动而开始导电。如果充入的气体压强不大[一般低于 20mmHg（1mmHg = 133.322Pa）]，电子、气体原子、放电空间内其他元素原子、正离子等相互间发生非弹性碰撞，导致电场内的原子、分子、离子等激发发光，称辉光放电。从阴极至阳极间整个电场空间内，随着电子、离子运动速度的不同，形成若干个明暗不同的区域。辉光放电可分为直流辉光放电和脉冲辉光放电。脉冲辉光放电是低压气体放电管在数千赫至数百兆赫的高频发生器作用下（电极可以置以管外，或把放电管放在高频感应线圈中）放电管内而产生的高频辉光放电。脉冲辉光放电和直流辉光放电相比优点是不需要内电极，免除了电极金属蒸气对管内气体污染，减少了气体吸附。脉冲辉光放电对气体物质的光谱分析很方便。也能分析卤化物之类易挥发的固体试样，适合于测定卤素、硫、硒、碲、磷、砷、汞等难激发元素。

脉冲激发 pulse excitation 对于仅用单个矩形射频脉冲激发一个核自旋体系，这单个矩形射频的傅里叶变换是一个强度随频率变化的连续谱。它以射频频率 f_1 为中心频率、强度极大且对称于频率为 f_1 的偶函数。它在中心频率 f_1 附近有一个平坦区，离开 f_1 两侧强度迅速下降，至 t_p^{-1} 处强度衰减至 0，通常脉冲宽度 t_p 尽可能地小，以便在 f_1 两侧的平坦区相当地宽，在该区所覆盖的谱宽频率范围内能获得几乎是等强度地激发。所以一个单脉冲激发实际上是以 f_1 为中心的一个连续频谱去照射自旋体系，相当于在所施加的脉冲宽度的时间间隔内完成了一次频率扫描，接收到的自由感应衰减（FID）信号经傅里叶变换得到频率谱。为了提高灵敏度，常采用周期脉冲来激发，是等间隔（间隔为脉冲周期的倒数）的离散的频率谱的激发。为了不使 NMR 谱中的谱线漏测，周期必须足够长，使其倒数必须小于最靠近的两条谱线之间的距离，在一般情况下这条件总能满足。

脉冲激光器 pulse laser 只能对工作物质作间断泵浦、得到的激光是脉冲式的激光器。通常所用的脉冲激光器包括有固体激光器、半导体激光器及高压气体激光器等。

脉冲宽度 pulse width 对核自旋体系施加射频激发脉冲（方型脉冲）的持续时间，称为脉冲宽度，记以 t_p。具有频率为 f_0，宽度为 t_p 的方波脉冲具有特定的频谱。它的主体在 $\left(f_0-\dfrac{1}{t_p}\right)$ 到 $\left(f_0+\dfrac{1}{t_p}\right)$ 区间内，并且其中以 f_0 为中心频率的相当宽的频谱区内各频率的射频辐射的强度几乎相等。正是利用这种强而短的射频脉冲的作用，可使不同化学环境中的核同时以等强度受到激发。

脉冲倾倒角 pulse frip angle 又称脉冲扳倒角。是在外加静磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中核自旋体系受到施加在 x' 轴方向上

的脉冲射频场 $B_1(\omega)$ 作用，当频率与体系共振频率 ω_0 相等时，沿 z 轴上的磁化矢量在旋转坐标系来看仅受到有效场为 B_1 的作用，因此它以 $\omega_1=\gamma B_1$ 的圆频率作进动。当这个射频场的发射持续 t_p 时间，则磁化矢量便离开 z 轴向 y' 轴倾倒 θ 角：$\theta=\gamma B_1 t_p$。因此 θ 称为脉冲倾倒角。当所施加的脉冲的持续间 t_p 能使体系磁化矢量倾倒 90° 的话，此脉冲宽度便称为 90° 脉冲，常常在微秒数量级。同样，若脉冲持续时间能使体系磁化矢量倾倒 180° 的话，此脉冲宽度便称为 180° 脉冲。

脉冲梯度场技术 pulsed field gradienttechnique; PFG 为获得分辨良好的 NMR 谱图，需要极其均匀的磁场。倘若在此基础上用脉冲方式在平行于静磁场方向（z 轴）上施加一个与之形成一个倾角 θ 的梯度磁场，体系磁化矢量的进动频率也随之作相应的变化，因此在空间位置上对体系作了"标记"，同时体系磁化矢量被均匀地散开，磁化矢量之和为零，观测不到信号。之后，若再施加一个与上一脉冲完全反向的脉冲，即强度的绝对值相同，作用时间相同，只是方向相反，它所形成的梯度磁场恰与上述的相反，作用也正相反，此时体系中散相的磁化矢量按空间位置又重新会聚在一起，这就是聚相（rephases）或重聚焦（refocus），这样便可使散相了的信号重聚得到检测。将梯度场脉冲和射频相结合，可以消除不希望要的信号，又能选取某特殊的磁化矢量成分（相干）聚相，予以检测，采用 PFG 只进行一次扫描就能选出用常规方法需要多次扫描和相位循环才能选出所需要的信号。梯度场脉冲一般使用半正弦波形。PFG 技术最早是在核磁成像（NMI）中作为定位之用。现在在二维谱及多维谱中已得到广泛应用。它可取代相位循环，减少多维谱的累加次数，大大缩短实验时间；利用相干选择，挑出有用信号而又可"过滤"掉不希望要的信号；可以有效地压制溶剂峰；降低演化期出现的噪音，显著改善谱图质量。

脉冲同核去耦 pulse homonuclear decoupling; HOM 连续波 NMR 方式的同核去耦是由频率为 ν_2 的干扰场 B_2 连续辐照被干扰的谱线来实现的。脉冲傅里叶变换 NMR 方式的干扰场 B_2 不能采用连续辐照，因为观测耦合核的 ν_1 与 ν_2 接近，B_2 信号会进入接收机影响观测信号的接收。去耦脉冲序列是一种梳状脉冲，它的脉冲宽度和重复时间应选定只有它的中心频率 ν_2 落在观测谱宽范围内，并使 ν_2 对准某条被干扰的谱线，而其他频率分量将落在波谱范围之外，也就是 B_2 只干扰谱中一条谱线，由此获得选择性的同核去耦。这个去耦脉冲序列是由采样脉冲触发，以保证同步工作。调整 ν_2 可实现对其他峰的同核去耦，调整 B_2 场强，可作各种选择去耦或完全去耦。在结构分析中用于简化图谱，消除大的溶剂峰。

脉冲雾化法 pulse nebulization 一种火焰原子吸收光谱分析的微量进

样方法。它与常规的连续进样不同，是一种间歇式进样，试样被瞬间引入火焰，产生一个脉冲峰形吸收信号。已发展多种的脉冲进样方式和装置。它的特点是用样量少，可用于高含盐量和高黏度样品，分析速度快。测定精度可以达到连续进样相同的水平。使用脉冲雾化法，要求仪器的响应时间要短。

脉冲序列与时序图 pulse sequence and time-order scheme 为获取试样的特定的 NMR 信息，需对试样施加射频激发脉冲或组合脉冲，然后接收激发体系弛豫过程的自由感应衰减（FID）信号，经过一个脉冲延迟时间恢复体系稳定的初始状态，构成一个完整的脉冲序列。为获取信噪比足够大的谱图需要重复这样的脉冲序列足够多次。将这样的脉冲序列按时间先后顺序绘出，即为脉冲的时序图。

脉冲阻尼器 pulse damper 用来减缓液流脉冲的装置。在液相色谱仪中，最常见和最简单的脉冲阻尼器是将内径 0.2～0.5mm 的不锈钢管绕成弹簧状，利用其挠性来阻滞压力和流量的波动，起到一定的缓冲作用。为了减小谱带展宽，也为了便于清洗和更换流动相，阻尼器的体积应尽可能小。

慢通过 slow passage NMR 实验以连续波扫场方式进行时，若通过共区的时间远远长于体系的弛豫时间 T_1 及 T_2，即 $\left(\frac{1}{B_l}\right)\frac{dB}{dt} \ll \frac{1}{T_2}$ 及 $\ll \frac{1}{T_1}$（B_l 为射频场强度，$\frac{dB}{dt}$是扫场速率）称为慢通过。Bloch 描述体系宏观磁化强度的 Bloch 方程的稳态解是利用了慢通过条件。

慢性毒性试验 chronic toxicity test 化学物质在动物体内积蓄的现象，是发生慢性中毒的基础。慢性毒性试验亦即长期地以一定方式与肌体接触而引起的毒性反应。其试验方法是，在实验动物的大部分生命期间将受试化学物质以一定方式染毒，观察动物的中毒表现，并进行生化指标、血液学指标、病理组织学检查。

漫反射光谱 diffuse reflection spectroscopy; DRS 红外光谱学的一种特殊采样技术。使用漫反射附件，可以获得近红外/中红外和远红外漫反射光谱。漫反射技术主要用于测量粉末样品和浑浊的液体。对粉末样品几乎不需要样品制备，只需用合适的基质将待测样品稀释，有效地消除镜面反射和避免产生吸收峰饱和现象。测量中红外漫反射光谱时，常用的稀释基质为 KCl 和 KBr 等。测量近红外和远红外漫反射光谱时，由于谱带强度弱，通常不加稀释基质。若需要加稀释基质，测量近红外漫反射光谱一般用硫酸钡粉末，测量远红外漫反射光谱通常用碘化铯或聚乙烯粉末。傅里叶变换红外光谱仪高通光量和高信噪比的优点结合高效收集光学漫反射附件的发展，使红外漫反射技术得到了广泛的应用。但漫反射光谱强度的重现性较差，用于定量分析结果的误差较大。

漫反射原理 diffuse reflection prin-

ciple 当光束入射到样品上时，一部分光在样品表面产生镜面反射；另一部分光经折射进入样品内部，在样品内部与样品分子作用而发生反射、折射、散射和吸收现象，最后光线由样品表面辐射出来，辐射出来的光由于散向空间各个方向而被称为漫反射光。由于漫反射光曾进入样品内部与样品分子发生作用，因此漫反射光将载有样品分子的结构信息，这是漫反射光谱技术工作的原理。

毛细管壁静态改性 static modification of capillary wall 为了尽可能地消除管壁对被分离物质的吸附，需要对毛细管壁处理改性，称为静态改性。通常是先用偶联剂和管壁单分子层作用，然后再接上相应的聚合物。

毛细管常数 capillary constant 极谱分析中使用滴汞电极，由于受贮汞瓶重力的作用，从直径为0.05～0.1 mm的玻璃毛细管底端连续地形成大小相同的汞滴。汞在毛细管中的流速 m（$mg \cdot s^{-1}$）和滴落时间（每滴间隔时间）t（s）是毛细管特性，而尤考维奇方程式 $i_d = 607nD^{\frac{1}{2}} m^{\frac{2}{3}} t^{\frac{1}{6}} c$ 中的乘积 $m^{\frac{2}{3}} t^{\frac{1}{6}}$ 称为毛细管常数。当汞柱高度增加时，流速 m 增大，滴落时间 t 减小，但两者的乘积几乎不变。当试液的浓度 c 一定时，极限扩散电流 i_d 的大小决定于 $m^{\frac{2}{3}} t^{\frac{1}{6}}$。因此对于同一试液，使用不同的毛细管，测得的 i_d 不同。m 和 t 都可以由实验测得，为了对不同毛细管的扩散电流进行比较，极谱分析报告中应注明 $m^{\frac{2}{3}}$ $t^{\frac{1}{6}}$ 的数值。毛细管常数除了受毛细管本身的几何形状、汞柱高度的影响外，滴汞时间 t 还受外加电位的影响，因为滴汞和溶液间的界面张力受汞滴电荷而变化。但是，扩散电流只随 t 的六分之一次方而变化，因此在一较小的电位范围内，这种变化可以忽略。

毛细管超临界流体色谱法 capillary supercritical fluid chromatography; CSFC 使用具有高分离效能的毛细管柱，以超过其临界压力、临界温度的流体作为流动相的色谱法。毛细管柱通常用内径 50～100μm 的石英交联柱，这种柱必须能耐流体冲洗及压力急剧升降波动的冲击。气相色谱法和液相色谱的检测器及质谱、红外光谱都可作为 CSFC 的检测器，但最常用的还是 FID 检测器（参见**氢火焰离子化检测器**条）。

毛细管的屏蔽效应 capillary shield screen effect 在推导滴汞电极上的扩散电流方程时，假定滴汞悬浮于溶液中，去极化剂从四面八方对称地向滴汞表面扩散，实际上，在滴汞的顶端是毛细管，其所遮盖的区域就没有扩散，因此，实际所得的电流值比利用方程式预期的理论值稍为小些。这种效应称为毛细管的屏蔽效应。

毛细管等电聚焦 capillary isoelectric focusing 基于不同蛋白质或多肽之间等电点（pH 值）的差异的分离模式。用两性电解质在毛细管内建立 pH 梯度，使各种具有不同等电点的蛋白质在电场的作用下迁移到等电点

的位置，形成窄的聚焦区带。

毛细管等速电泳 isotachophoresis 毛细管电泳分离模式之一。是基于样品中各组分电泳迁移率的差异，但是与毛细管区带电泳不同的是，等速电泳采用的是非连续的电解质溶液——前导电解质溶液充满整个毛细管，其淌度高于任何样品组分；终结电解质溶液置于一端的电泳槽中，其淌度低于任何样品组分。被分离组分按其不同的淌度夹在中间，所有组分按相同的电泳迁移速度一次流过检测窗口。

毛细管电色谱 capillary electrochromatography 将HPLC中固定相微粒填充到毛细管中，以电渗流或电渗流与高压泵结合为流动相驱动力，溶质根据它们在流动相与固定相中分配系数不同和自身电泳淌度的差异得以分离的一种新型高效微分离技术。

毛细管电泳 capillary electrophoresis 溶液在毛细管中带电粒子在电场作用下发生迁移的电动现象。

毛细管电泳电化学法 capillary electrophoresis electrochemical method 将毛细管电泳和电化学检测相结合的分离分析方法，它具有灵敏度高（检出限可达 10^{-15} ~ 10^{-19} mol · L^{-1}），分离速度快，分离效率高（柱效可达几十万理论塔板数），而且取样体积小（1 ~ 10nl），可获得大量信息等优点。可用于有机、无机物，糖类及高聚物的分离和分析，特别是用于多种药物的手性拆分和测定，为手性药物的合成，筛选和药效研究提供了简便有效的手段。

毛细管电泳电喷雾质谱联用 capillary electrophoresis-electrospray ionization mass spectrum；CE-ESI/MS 以电喷雾接口技术将毛细管电泳系统与质谱仪连接。在高电场（3 ~ 10kV）中，样品溶液在电喷雾离子化毛细管柱端形成荷电的液滴，经过溶剂的不断蒸发形成极小的气相离子，然后进入质谱分析器。

毛细管电泳基质辅助激光解吸电离质谱离线检测 off-line capillary electrophoresis-matrix-assisted laser desorption/ionization-mass spectrometry；off-line CE-MALDI-MS 将毛细管电泳分离的样品先离线收集，然后将样品组分与基体溶液混合后滴入探针平面上，在室温干燥后放入质谱计，用高强度脉冲激光辐射，产生气相的分子离子进行质谱分析的一种新方法。

毛细管电泳离子分析 capillary ion analysis 将毛细管电泳用于分离分析无机离子和可离解的有机分子。

毛细管电泳免疫分析 immunity analysis of capillary electrophoresis 毛细管电泳与免疫分析联用的分析方法。它是利用抗原抗体复合物与游离的抗原、抗体在电泳行为上的差异，将毛细管电泳作为免疫分析中的分离与检测手段。这种联用方法具有免疫分析的高选择性、电泳的高分离效率和检测的高灵敏度。

毛细管分析 capillary analysis 一种简单的定性鉴定物质的方法。它是基于反应产物被滤纸吸附程度的不

同，利用其在滤纸纤维内扩散移动速度的差别，观察反应产物斑点的移动情况来进行物质鉴定的方法。

毛细管胶束电动色谱 capillary micellar electrokinetic chromatography 在电泳缓冲溶液中加入表面活性剂，当溶液中表面活性剂浓度超过临界胶束浓度（c_{mc}）时，表面活性剂分子之间的疏水基团聚集在一起形成胶束（假固定相），溶质基于在水相和胶束相之间的分配系数不同而得到分离。

毛细管凝胶电泳 capillary gel electrophoresis 在毛细管内充有凝胶或其他筛分介质，将生物大分子，如蛋白质、DNA 片断，按分子量大小进行分离的一种分离模式。

毛细管凝胶柱 capillary gel column 以凝胶物质作为支持物的毛细管柱。

毛细管气相色谱法 capillary gas chromatography 使用具有高分离效能的毛细管柱以分离复杂组分的气相色谱法。1957 年 Golay 用一根长 1m、内径 0.8mm、内涂固定液的柱子进行了实验，结果发明了一种效能极高的色谱柱，人们习惯称它为毛细管色谱柱。这是一种内径只有 0.1 ~ 0.5mm，长度 10 ~ 300m 的空心色谱柱，理论塔板数可达 2000 ~ 5000，总柱效最高可达 10^6。对分析复杂有机混合物开辟了广阔的前景。近年来，又出现了许多新的毛细管色谱柱型，如多孔层开管柱、石英弹性开管柱、键合、交联开管柱等。

毛细管亲和电泳 affinity capillary electrophoresis 是亲和技术在毛细管电泳中应用而形成的毛细管电泳的一个新分支。它是配体（蛋白质、肽及其他小分子）与受体之间存在不同的作用力或不同的结合常数，形成具有不同荷质比的配合物，利用毛细管电泳进行分离和检测。

毛细管区带电泳 capillary zone electrophoresis 毛细管电泳最基本的一种分离模式。毛细管和电极槽内充有相同组分和相同浓度的背景电解质溶液（缓冲溶液），样品从毛细管的一端（进样端）导入，当毛细管两端加上一定的电压后，荷电溶质便朝其电荷极性相反的电极方向移动，由于样品组分间的淌度不同，它们的迁移速度不同，因而经过一定时间后，各组分将按其速度（或淌度）大小顺序，依次到达检测器被检出，得到按时间分布的电泳谱图。

毛细管有效长度 the effective length of capillary electrophoresis 在毛细管电泳中，毛细管的进样端至检测窗口的距离为毛细管的有效长度。

毛细管噪声电流 capillary yawp current 当汞滴滴下时，毛细管中的汞向上回缩，毛细管管口的溶液渗透进入毛细管，在汞线和毛细管管壁之间形成不规则的溶液薄膜。这部分汞线的电势跟随滴汞电极电势的变化，产生了不规则的充电电流和溶液薄膜中离子的氧化还原反应所产生的毛细管电流。这层液膜的厚薄和长短，对每滴汞无重现性，不规则，因此表现为噪声。

毛细管柱的交联 cross-linked capil-

lary 在毛细管色谱柱中，最常用的聚硅氧烷固定相是生胶，是线型分子，通过高温缩合反应使涂渍在毛细管内壁的线型分子固定相进行交联，从线型结构变成网状结构，以提高色谱柱固定相的稳定性和耐热性。而且，当色谱柱被污染时还有利于色谱柱的清洗。

毛细管柱去活 capillary column deactivation 封闭或除去存在于石英毛细管表面的有吸附活性的活性基团，主要是硅醇基和硅氧桥基团操作。性能良好的毛细管柱应具备柱效高、吸附活性低、热稳定性好及保留性能重复性好的特点，若要达到上述的要求，去活是必不可少的步骤。去活的方法很多，但是没有一种是万能的去活方法，必须依照柱子的材质和所涂固定相的不同而采取不同的去活方法。

煤对二氧化碳的反应性 carboxy reactivity 也称煤对二氧化碳化学反应性。指煤在规定条件下将二氧化碳还原为一氧化碳的能力，或者说煤中的碳与二氧化碳进行氧化还原反应的反应能力，它以被还原成一氧化碳的二氧化碳量占参加反应的二氧化碳总量的百分数来表示。煤的反应性与煤的气化和燃烧有密切关系，它直接反映了煤在炉中的作用情况。反应性强的煤在气化和燃烧过程中，反应速度快，效率高。反应性强弱直接影响炉子的耗煤量、耗氧量及煤气中的有效成分等。因此，测定煤的反应性，对于进一步探讨煤的燃烧、气化机理有一定的价值，可以作为一种评价煤质量的指标。

煤样 pitch sample 是将煤炭粉末掺杂在 KCl 中制成的一种 ESR 标准样品。在真空状态下制备和封装可获得长寿命的稳定自由基，且介电损耗低，其信号来源于煤炭中包含的碳自由基。煤样一般分为强煤和弱煤两种。

酶 enzyme 由生物体内产生的具有特异催化作用的一类蛋白质。每种酶仅能催化一种类型的反应，具有底物特异性，特异性由其构象所决定。底物与酶的特定作用区域，称为酶活性部位。按照底物性质和催化反应的类型不同，酶分为 6 大类：氧化还原酶、转移酶、水解酶、裂解酶、异构酶和连接酶。每个酶通常有两个名称：俗名和系统命名。大多数俗名是在底物名之后加上 ase，如纤维素酶——cellulase；有的则在反应名称之后加上 ase，如脱氢酶——dehydrogenase。系统命名中每个酶以 4 个数字组成的数码表示，第 1 个数字代表酶的大类（即参与的反应类型），第 2,3 个数字代表亚类和亚亚类（即参与反应的特异性基团），第 4 个数字代表单一绝对定义序号。

酶标记 enzyme labeling 一种组织中探寻抗原或抗体的方法，它的依据是将抗原或抗体与一种酶结合，然后利用酶的已知性质测定酶在组织中的位置。

酶传感器 enzyme sensor 将酶分子通过吸附、键合、交联或包埋等方

式固定于一定的转换器表面而构置的传感器。

酶催化动力学分光光度法 enzyme-catalytic kinetic spectrophotometry 利用酶对某些反应的催化性，或某些组分能阻抑或促进酶催化反应的性质所建立的一类测定酶、底物（生物有机分子）、激活剂和抑制剂（无机离子）的催化动力学分光光度法，即利用底物浓度对酶催化反应的反应速度的影响测定酶、底物；利用低浓度时酶反应的初始速度与激活剂的浓度成正比，测定激活剂的浓度；利用抑制剂的存在会引起酶活性丧失，降低催化反应速度，测定抑制剂的浓度等。酶是一种生物催化剂，具有极高的催化效率（酶催化反应的反应速度比一般化学催化剂催化反应速度高 $10^5 \sim 10^{14}$ 倍）；每一种酶只能催化一种反应，有高度专一性，故方法的选择性很好；酶催化反应的条件温和（一般在 20 ~ 40℃，pH = 4 ~ 9 的水溶液中进行，无需特殊试剂），故酶催化动力学分光光度法有重要的应用前景。

酶的别构效应 enzyme allosteric effect 体内一些物质（别构效应剂），能够影响酶分子的构象因而能增加或抑制酶的活性。效应剂是以非共价键的形式结合到酶分子的特定调节部位（调节基团或位点）后，可以改变酶的构象，从而影响酶活性部位与底物的结合。

酶的放射化学测定法 enzyme radiochemical assay 一种测定酶活性的方法。用已知比放射性活度的标记物为底物与酶进行反应，酶反应停止后，用合适的方法分离反应产物与剩余的放射性底物，测定反应产物或剩余底物的放射性活度，求得被测定样品中酶活性单位。该法的特点是灵敏度高，特异性强，简便快速。

酶电极 enzyme electrode 将酶覆盖在通常的离子选择性电极的敏感膜上，试液中被测物向酶膜扩散，并与酶层接触发生反应，引起被测物或产物活度的变化，被离子电极所响应。酶电极由于酶催化反应的选择性很强，在生化分析中具有重要的意义。

酶活性单位 enzyme activity unit 酶的浓度用活性单位表示。酶活性单位是指在规定的条件下（即温度、pH 值和足够的底物浓度等）使某一酶促反应达到一定速度需要的酶量，速度一般以单位时间（秒、分或小时计）内反应物的变化量来表示之。1 国际单位为在规定条件下催化 1μmol 底物变化的酶量。

酶联免疫传感器 enzyme linked immunosensor 利用酶分子的放大作用，将酶标记的抗体或抗原分子固定于一定的转换器表面而构置的传感器。

酶联免疫分析法 enzyme-liked immunosorbent assay；ELISA 又称酶联免疫吸附试验。将可溶性抗原或抗体吸附于固相载体上，利用酶标记的抗体或抗原与相应的抗原或抗体结合，形成酶标记的免疫复合物，加入相应的酶的底物，根据颜色深浅判断结果

的酶免疫技术。主要用来检测可溶性抗原或抗体。

酶联免疫吸附测定 enzyme-linked immunosorbent assay; ELISA 利用特异性抗体或抗原包被（吸附）在一种固体（塑料）板条小孔或小管中，然后，用一个结合物（即与特定酶联结的抗体球蛋白或抗原）处理试验体系来测定抗原抗体结合物，洗去实验体系中未结合的结合物，同适当的底物一起保温、再用分光光度计或酶标仪测定酶裂解产物，检查结合酶是否存在，并判定结果。酶联免疫法目前应用十分广泛，有直接法、间接法和竞争法等。市场上已有商品化的检测试剂盒出售。

酶免疫分析 enzyme immnunoassay 先将抗原与酶经缩合或用交联剂制成抗原-酶复合物，并同时加入无标记抗原，在抗体上发生酶标记和无标记抗原竞争性反应，用适当方法分离抗体-抗原-酶复合物，分别测定结合型和游离型的酶活性。从多个不同量的无标记抗原（标准抗原）按同样操作分别得到的信号值，可以绘制标准曲线，样品按同样的操作所得到信号值，可以从标准曲线上求得检品中抗原的量。此外还有采用酶标记抗体方法、测定抗体的方法、多价抗原的夹心式结合的方法等，这些方法都需要将结合型和游离型进行分离。酶标记免疫分析测定不需要特殊的设备，操作简单。

酶抑制法 enzymatic inhibition method 利用一些农药对酶的抑制作用进行农药分析的方法。有机磷或氨基甲酸酯农药对动物组织或血液中的胆碱酯酶和羧酸酯酶有强抑制作用，酶对基质进行水解后生成物的数量与酶的活性有关，而酶的活性又与农药含量有关，故而可知农药的含量。此法简便快速、灵敏、不需贵重仪器，但准确度和精密度不高、有时又有干扰，且不能确定农药存在的具体成分。

每日允许摄入量 acceptable daily intake; ADI 指人的一生中、每日摄入某一种农药一定剂量后，没有发现明显危害，即在观察生命过程中或完结后未发现由此引起任何伤害。ADI 的单位为 $mg \cdot kg^{-1}$，药物量以 mg 计，人体重平均以 60kg 计。每日允许摄入量是农药毒理评价的首要指标。数据是通过对实验动物长期慢性毒性试验而取得的，除必须进行致癌、致畸、致突变试验外，还需进行神经毒性（特别对于有机磷农药抑制乙酰胆碱酯酶的活化作用）、遗传基因毒性、免疫毒性、体内吸收、分布、代谢和消解等项目的试验。根据几代动物代谢试验数据，确定某种农药的最大无作用剂量。将这个动物毒性试验数据，除以安全系数外推至人体确定 ADI 值。

门控去耦 Gated decoupling 在脉冲傅里叶变换 NMR 实验中，用控制辐照通道射频发射机的开关（门），对体系中某核进行去耦和不去耦的方法。在 ^{13}C-NMR 谱中，门控去耦是指对 ^{13}C 核施加一个观测脉冲（比如

90°脉冲）之前，启开辐照通道的射频发射使^1H去耦，随之与^1H耦合的^{13}C核因NOE效应随着辐照时间的延长会使信号增强，为了保留^{13}C-^1H的耦合信息，在观测脉冲之后迅速截断辐照通道，此时尽管观测到的^{13}C谱是全部耦合谱，却获得了增强了的信号，提高了信噪比。此法用于同种核素时，往往可消除大的溶剂峰，比如水峰。避免大信号过大而影响有用的小信号的检测，称为同核门控去耦。

门尼黏度 mooney viscosity 一种表示橡胶可塑度的指标。在一定温度、时间和压力下，置于门尼黏度计活动面（转子）和固定面（上下模腔）之间试样变形时所受的扭力来确定。其值视测试条件不同而异，通常应注明测试条件。在我国通常以ML1 + 4100℃或MS1 + 4100℃来表示。其中M表示门尼，L表示用大转子，S表示用小转子。1表示预热1min，4表示试验4min。门尼数值越大，表示黏度越大，其可塑性越低。广泛用来作为控制橡胶胶料工艺性能的一项指标。

锰标 MnO marker 将2价锰离子掺杂于氧化镁中得到的Mn^{2+}/MgO固溶体粉末，作为ESR测试时的标准样品，其ESR谱为等高的六重峰，主要用于校正磁场扫场宽度并用于确定样品的g值。锰标ESR谱线中第3条峰的g值为2.034，第4条峰的g值为1.981。由锰离子引起的第3条和第4条峰之间的超精细耦合裂分常数为8.69mT。

密码样品 coded sample 已知其特性量值，但又作为“未知”试样发给实验室或分析人员使用的以检查与评定其分析技术水平和分析测试质量的样品。密码样品可以是标准物质，亦可以是各级管理样。

免疫 immune 是指机体免疫系统识别“自己”与“非己”抗原物质的过程。对自己抗原物质无天然耐受能力，而对非己抗原物质产生排异作用的一种生理功能。正常情况下，这种功能对机体是有益的，可产生抗感染、抗肿瘤等作用以维持机体生理平衡和内环境的稳定的保护机制。在一定条件下，免疫功能失调时可产生对机体有害的反映和结果，如超敏反应、自身免疫性疾病和肿瘤等。

免疫标记技术 immunolabelling technique 将抗原-抗体反应与标记技术相结合，用以检测抗原或抗体的一种试验方法。通常用荧光素、酶或放射性同位素标记抗体或抗原进行试验，标记后抗体或抗原仍能表现原有的生物学活性。免疫标记技术敏感性高，特异性强，应用范围广，不但可以对抗原或抗体进行定性或定量测定，而且还可用来观察抗原、抗体或抗原-抗体复合物在组织、细胞内的分布和定位。根据标记物种类的不同，本技术可分为三种基本类型，即免疫荧光技术、免疫酶技术和同位素标记技术。

免疫传感器 immunosensor 一种能检测抗原或抗体的传感器。可以应

用于测定各种抗原、半抗原和抗体，分析范围包括能够进行免疫反应的多种生物活性物质（如激素、蛋白质）、药物和毒物等。

免疫电极 immunity electrode 利用抗原抗体之间的特异性结合反应而制成的电极。把抗原埋存于膜中仿酶电极，可测定抗体，反之若把抗体埋存于膜中仿酶电极，则可测定抗原。

免疫放射分析 immunoradiometric assay; IRMA 一种以放射性同位素标记的抗体与不足量抗原之间特异性结合反应为基础的微量分析技术。放射性标记抗体 A_b^* 与不足量的抗原 A_g 发生反应，生成 $A_g-A_b^*$ 复合物，加入抗体免疫吸附剂吸附在免疫反应中剩余的标记抗体 A_b^*，离心分离后，分别测定上清液和沉淀部分的放射性活度。随着样品中抗原 A_g 量增多，生成的 $A_g-A_b^*$ 复合物就多，在上清液中测得的放射性活度就高，与相同条件下的标准曲线比较，可以计算出样品中抗原 A_g 的含量。它与放射免疫分析的区别是标记抗体，而不是标记抗原。特点是高灵敏度和特异性、用样量小，方法简便，特别适合于不易标记的抗原或标记后容易失活的生物活性物质的测定。

免疫酶技术 immunoenzymatic technique 当前应用最为广泛的免疫检测方法之一。本法将抗原-抗体反应的高度特异性与酶对底物的高效催化作用有效结合起来，根据酶作用底物后的颜色变化，可用酶标记测定仪作定性或定量分析。常用于标记的酶有辣根过氧化物酶（horseradish peroxidase, HRP）和碱性磷酸酶（alkaline phosphatase），它们与抗体或抗原结合后，本身活性不受影响，也不影响抗体或抗原的生物学活性。相应底物为邻苯二胺和对硝基苯磷酸酯。近年发展起来的酶联免疫吸附实验是免疫酶技术的一个重大改进。

免疫亲和层析法 immunoaffinity chromatography 以化学法将特异性抗体免疫球蛋白（或特异性抗原）吸附到分子筛上去，然后装填层析柱；当被检测的样品过层析柱时，其与相应的抗原（或抗体）相结合，然后以某一种淋洗液进行洗脱，以除去其他未被结合的非特异性物质，并在某一洗脱段回收已离解的特定抗原（或抗体）物质。本法用于在混合样品中提取单一物质。

免疫球蛋白 immunoglobulin; Ig 是指具有抗体活性或化学结构上与抗体相似的球蛋白。抗体是免疫球蛋白，但免疫球蛋白不一定为抗体。免疫球蛋白普遍存在于血液、组织液及外分泌液中，具有蛋白质的通性，不耐热，在 60～70℃ 即被破坏，能被多种蛋白酶水解，也能使蛋白质凝固变性，破坏抗体活性，可被中性盐类沉淀，常用 50% 饱和硫酸铵或硫酸钠从免疫血清中提取抗体球蛋白。人类 Ig 根据其重链稳定区的分子结构和抗原特异性不同，可分为五类，即 IgG、IgA、IgM、IgD 和 IgE。它们的重链分别以小写希腊字母 γ、α、μ、δ 和 ε 表示。每类免疫球蛋白可能有

亚类存在，称为免疫球蛋白亚类。人血清中以 IgG 含量最多，IgA 次之，IgM 较少，IgD 与 IgE 仅微量。Ig 分子巨大，含有 1000 个以上的氨基酸残基。各类 Ig 具有一定的结构和特点。

免疫荧光 immunofluorescence 一种采用荧光染料标记抗体与细胞或组织切片作用，以寻找与抗体相作用的特异性蛋白质的方法。用此方法可以定位某一蛋白质在细胞中或组织中的位置。

免疫荧光法 fluoroimmunoassay；FIA 利用异硫氰酸荧光素等荧光性物质标记抗原或抗体，通过荧光检测跟踪抗原抗体反应，从而测定抗体或抗原含量的方法。即标记免疫反应是通过荧光标记进行的，与同位素免疫、酶免疫分析的测定原理相同。免疫荧光技术主要包括三种方法，即直接法、间接法和补体法。

免疫原 immunogen 又叫抗原(antigen)。任何一种能够诱导机体产生专一性抗体并能与该抗体或相应的 T 细胞受体发生特异反应的物质。一种物质的抗原性通常决定于抗原分子的大小及其化学构型。分子量小于 10000 的蛋白质产生抗体的效果较差。一个抗原可有多个抗原决定簇。

面探测器 area detector 在单晶 X 射线衍射实验中，可以同时记录许多条衍射线的方向和强度的检测器。使用面探测器可以大大地减少收集衍射数据的时间，这对于在 X 射线的照射下会缓慢分解的单晶和需要收集大量衍射数据的蛋白质单晶是十分有利的。根据检测器的检测原理，面探测器可以分为多丝正比室（multiwire-propertional chamber，MWPC）、影像板（imaging plate，IP）、电荷耦合器件（charged coupled device，CCD）检测器等几大类。

面心格子 F-centered lattice 在正交和立方晶系中可能出现的复格子。其特点是：平行六面体单位格子（晶胞）的三对平行平面的面中心处同时存在着附加点阵点，每个面心晶胞中含有四个点阵点。

敏感性试验 sensitivity test 应用假定的抗原进行皮内注射来测定速发型超敏反应与迟发型超敏反应的皮肤试验。这名词也用于在体外测定微生物对化学治疗药物的易感性试验。

敏化室温磷光法 sensitized room temperature phosphorimetry；S-RTP 一种基于能量转移的流体室温磷光法。本身无磷光或磷光很弱的物质（称供体）被激发到三线态，将其能量转移给另一种能发磷光的物质（称受体），利用受体三线态的 RTP 发射特性实现对供体的测定。实现 S-RTP 应满足：受体三线态能量低于供体三线态能量，且有高的磷光量子产率；在供体的激发波长处受体无吸收或吸收可忽略。常用的受体有联乙酰和1,4-二溴代萘。

敏化原子荧光 sensitized atomic fluorescence 激发原子通过碰撞将其激发能转移给另一个原子使其激发；后者再以辐射方式去活化而发射荧

光，此种荧光称为敏化原子荧光。发生敏化荧光的过程中能量的转移者需要有一个高的荧光量子产率，而且能量转移速率必须超过（或者至少不明显地小于）由扩散控制的淬灭速率，这才在分析上有使用价值。火焰原子化器中的原子浓度很低，主要以非辐射方式去活化，因此观察不到敏化原子荧光。

明场像 bright-field image 在透射电镜中，如果用物镜光阑挡住衍射束，只让透射束和所有小角度非弹性散射电子穿过光阑孔成像，称为衍射衬度明场像。通常衍射衬度明、暗场成像分析总是与选区电子衍射相结合来确定物相的显微形态、点阵类型和参数。

模板 template 是模板合成、分子印记等反应中使用的具有特定结构和官能团的分子或离子。在生物大分子的天然合成中模板分子也是无处不在。比如已有的大分子的一级结构对新合成的大分子的一级结构起决定性作用，则已有的大分子便称为模板。在DNA的自复制过程中，即使将双螺旋拆开使之成为单独的两条长链，则每条长链在新的合成过程中都会形成与原来结构完全相同的双螺旋。此时原来链中碱基的排列便是决定新合成链中碱基排列的模板。

模板合成 template synthesis 以离子或分子作为模板进行的合成反应。模板合成与没有模板存在下的合成相比，产率一般要高。如两端具有反应官能团的伸缩型分子反应时会生成各种寡聚物或高聚物，而模板分子存在时会经过将其包围的反应中间体而生成特定结构、高产率的产物。模板合成实际上是模板分子与单体的分子识别过程。最典型的例子便是以金属离子为模板的冠醚的合成，其中就涉及一种包围了金属离子的中间体。

模糊概率 fuzzy probability 模糊事件发生的概率。模糊事件是指试验之前无法确定其试验结果、且试验的结果具有模糊性。模糊性和随机性都是不确定性，描述模糊性的隶属函数与描述随机性的概率函数都是在[0，1]区间取值，但两者有着本质的区别。随机性是指随机事件是否发生在试验之前无法确定，但试验结果十分明确，大量试验结果呈现统计规律性；而模糊性不仅在试验之前无法确定其试验结果，且试验结果仍具有模糊性，需用模糊数学方法来研究与处理。

模糊聚类分析 fuzzy clustering analysis 根据模糊等价关系进行分类，是聚类分析的一个分支。若模糊集中元素之间建立了等价关系R，并以隶属度λ作为聚类的判据，λ在[0，1]之间取值，若模糊集中任意两元素的隶属函数值$\mu_{\underset{\sim}{R}}(x,y)\geq\lambda$，则判$x$与$y$为同一类，否则，不属于同一类。模糊聚类与模糊识别都是分类，但两者是有区别的，前者没有任何模式可以依循，聚类中心是在聚类过程中产生的；后者是已有模式或标准样本，只是要求正确地将对象归属于哪一种模式，即哪一类。

模糊聚类-偏最小二乘光度法 fuzzy cluster-partial least squares regression spectrophotometry 将化学计量学模糊聚类方法与偏最小二乘法相结合对混合组分进行分析的一种分光光度法。该法充分利用偏最小二乘法的强解析能力和聚类分析对数据信息的归类与预测能力，首先对未知样品和校正样品进行归类，获得与未知样品相关的浓度配比方面的信息，进而建立与之相关联的偏最小二乘法校正模型，提高测定的精度。该法目前已用于地质样品的分析。

模糊模式识别 fuzzy pattern recognition 应用模糊数学方法进行模式识别。分直接与间接模糊模式识别。前者是按最大隶属度原则归类，设有 n 个模糊子集 $\underset{\sim}{A}_1$，$\underset{\sim}{A}_2$，…，$\underset{\sim}{A}_n$，要对某一对象 u_0 归类，若隶属度 $\mu_{\underset{\sim}{A}_i}(u_0)=\max[\mu_{\underset{\sim}{A}_1}(u_0),\mu_{\underset{\sim}{A}_2}(u_0),\cdots,\mu_{\underset{\sim}{A}_n}(u_0)]$，则将 u_0 归属于 $\underset{\sim}{A}_i$ 类。后者按择近原则归类，要对模糊子集 $\underset{\sim}{B}$ 归类，若 $\underset{\sim}{B}$ 与 $\underset{\sim}{A}_i$ 贴近度 $(\underset{\sim}{B},\underset{\sim}{A}_i)=\max[(\underset{\sim}{B},\underset{\sim}{A}_1),(\underset{\sim}{B},\underset{\sim}{A}_2),\cdots,(\underset{\sim}{B},\underset{\sim}{A}_n)]$，则将 $\underset{\sim}{B}$ 归属于 $\underset{\sim}{A}_i$ 类。

模糊信息 fuzzy information 由模糊现象所获得的不精确的非定量的信息。在客观世界存在大量的模糊现象，如“衣服好看不好看”、“美与丑”、“水质好坏”等，其界线是模糊的，所获得的信息亦是模糊的，但并非是不可靠的。模糊性问题是1965年由美国L. A. Zadeh首先提出。模糊信息需用模糊数学方法处理，通过抽象、概括、综合、推理，可以从模糊信息中得出具有一定精度的结论。

模糊综合评判 fuzzy comprehensive evaluation 在考虑各因素影响的条件下，用模糊数学的原理和方法对被评判的事物做出综合评价。若已知单因素的模糊评价矩阵

$$\underset{\sim}{R}=\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1m} \\ r_{21} & r_{22} & \cdots & r_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ r_{n1} & r_{n2} & \cdots & r_{nm} \end{bmatrix}$$

和各影响因素的权值，记为模糊集 $\underset{\sim}{A}=(a_1,a_2,\cdots,a_n)$，则模糊综合评判矩阵为 $\underset{\sim}{B}=\underset{\sim}{A}\circ\underset{\sim}{R}$，矩阵中的元素-隶属度，即为综合评判的结果。它在环境水质评价、分析方法和分析结果的评价方面都有重要的应用。

模拟标准物质 simulated reference material 其基体和被测样品的基体相近的标准物质。在基体中加入一定量的常量组分与被测定的痕量组分，制成标准物质。如水质标准物质，在纯水内加入一定量的常量元素钾、钠、钙、镁、铝、氯离子和被测定痕量元素，以及稳定剂制备而成。参见标准物质条。

模式识别 pattern recognition 一种从大量信息和数据出发，在专家经验与已有认识的基础上，用计算机和数学推理方法，对形状、模式、曲线、数字、字符格式和图形自动完成

识别的过程。模式识别包括学习与实现（识别）两个相互关联的阶段，前者是对样本进行特征选择，寻找分类的规律，后者是根据分类规律对样本集进行分类与识别。它分为有监督模式识别与无监督模式识别，前者是已知道样本的类别数，后者是不知道样本类别数，要在学习的过程中完全依靠样本自然特性对样本进行识别与聚类。模式识别可用来解释光谱数据、进行药物分类、研究定量构效关系、确定污染源、早期诊断癌症、识别真伪商品等。

模数/转换 analog/digital conversion 将连续的模拟信号（量）转变为数字信号（量）。由分析仪器直接产生的分析信号是模拟信号，计算机处理的是数字信号，因此，需将模拟信号通过模/数转换电路将其转变为数字信号，然后才能对分析测试数据进行处理。

模型法 model method 又称试差法。是晶体结构测定中破解相角问题的一种方法。主要是根据晶体的对称性、晶体的性质、晶胞中包含的原子种类和数目、衍射花样的特征和已知的结构化学规则和原理，为待测结构提出合理的模型或测定结构的辅助数据，以破解相角问题。模型法在晶体结构测定中，曾经起了很大的作用，现在仍然是测定晶体结构的重要辅助方法，也是检验结构是否合理、正确的重要手段。

膜萃取 membrane extraction 膜萃取是膜技术与萃取过程相结合的新型膜分离技术，又称固定膜界面萃取。与通常的液-液萃取中一液相以小液滴形式分散在另一液相中进行两相接触传质的情况不同，膜萃取过程中，萃取剂与料液分别在膜两侧流动，传质过程是在分隔两液相的微孔膜表面进行，没有相分散行为发生。

膜电化学 membrane electrochemistry 用电化学技术，如常用的循环伏安、交流阻抗、交流伏安、计时安培等研究生物膜和仿生膜的物理化学性质，如电子传递、光传导，离子选择性、膜的导电性和绝缘性等。

膜电容 membrane resistance 常用 C_m 表示。表征膜双电层电荷密度和膜厚度的电化学参数。双层磷脂膜的膜电容约为 $0.5F \cdot cm^{-2}$。

膜电阻 membrane resistance 常用 R_m 表示。表征膜的传荷能力的电化学参数。双层磷脂膜的膜电阻约为 $10^8\Omega \cdot cm^2$。

膜分离技术 membrane separation technique 1748 年 Abble Nelkt 发现水能自然地扩散到装有酒精溶液的猪膀胱内，首先揭示了膜分离现象。它的主要特点是以具有选择透过性的膜作为组分分离的手段。选用对所处理的均一物系中的组分具有选择透过性的膜，就可以实现混合物的组分分离。膜分离过程的推动力不仅是浓度差，也可以是压力差、分压差和电位差。主要有渗析式膜分离、过滤式膜分离和液膜分离。

膜击穿电压 breakdown voltage of membrane 保持膜不被击穿的最高允

许电压。当对膜电极进行电压扫描时，电压超过一定范围后，膜就会被击穿，绝缘性能被破坏。平板双层磷脂膜的击穿电压为200mV，支撑双层磷脂膜的击穿电压为1.5V左右。

膜进样质谱法 membrane inlet mass spectrometry; MIMS 亦称膜导入质谱法（membrane introduction mass spectrometry）。将样品透过用聚乙烯或聚四氟乙烯、硅（橡胶）等材料制成的膜，导入离子源的方法。可以利用膜的透过特性（如亲水性、疏水性），有选择性地进行样品的导入。

膜弹性 membrane elasticity 垂直于固体支撑双层磷脂膜（s-BLM）表面方向的膜的可压缩性。常用杨氏模量 E 表示。

摩尔电导 molar conductance 含有1mol电解质的溶液在距离为1cm的两电极间所具有的电导。其单位为西·厘米^2·摩$^{-1}$（$S \cdot cm^2 \cdot mol^{-1}$）。

摩尔吸收系数 molar absorptivity 比耳定律 $A = Kbc$ 是吸光光度法的定量分析基础。当 c 的单位为 $g \cdot L^{-1}$，b 的单位为cm时，则 $A = abc$，比例系数 a 称为吸收系数、单位为 $L \cdot g^{-1} \cdot cm^{-1}$；当 c 的单位为 $mol \cdot L^{-1}$，b 的单位为cm时，则 $A = \varepsilon bc$，比例系数 ε 则称为摩尔吸收系数，单位为 $L \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1}$；数值上 ε 等于 a 与吸光物质的摩尔质量的乘积。ε 的物理意义是：以一定波长的光通过1cm内含浓度为 $1mol \cdot L^{-1}$ 吸光物质的吸收池时所产生的吸光度值 A。ε 值决定于入射光的波长和吸光物质的吸光特性，亦受溶剂和温度的影响。显然，显色反应产物的 ε 值愈大，基于该显色反应的光度测定法的灵敏度就愈高。

摩尔旋光度 molar rotatory power 见比旋光度条。

魔角 magical angle 在样品表面上，谱仪的输入透镜轴和X射线方向之间的夹角。设定在54.7°这个特定的角度时，不同轨道非对称参数的影响可以消除。

魔角旋转 magic angle spinning 固体NMR谱一般谱宽很宽，不易指认。若采用机械转动，使样品绕与外场 B_0 成 β 角的轴快速旋转时，则所有核取向的平均值都沿此旋转轴，当设置此角 $\beta_m = 54°44'$，则含有角度因子 $(3\cos^2\beta - 1)$ 各项的值皆为零。此角 β 称为魔角。β 角是耦合核连线与磁场 B_0 方向的夹角或核主轴的方位角。固体试样在此角度下以大于静态谱宽的转速旋转（>10kHz）可消除偶极，四极矩，化学位移与自旋耦合向异性作用项，从而获得固体高分辨NMR谱。

莫尔法 Mohr method 以 K_2CrO_4 为指示剂，利用与 $AgNO_3$ 的沉淀反应滴定 Cl^-、Br^-、I^-、CN^- 等离子的方法。例如，以 $AgNO_3$ 标准溶液滴定含 Cl^- 的中性溶液时，由于AgCl的溶解度比 Ag_2CrO_4 小，溶液中首先生成 $AgNO_3$ 沉淀，待滴定到化学计量点附近时（AgCl沉淀完全），由于 Ag^+ 浓度迅速增大，达到 Ag_2CrO_4 溶度积，立即生成砖红色的 Ag_2CrO_4 沉

淀，指示滴定终点。

莫塞莱定律 Moseley's law X射线光谱分析中的一条基本定律。即各种元素的原子序数与其特征X射线波长倒数的平方根成直线关系，此定律的数学表达式为

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}}=K(Z-\sigma)$$

式中，λ为特征X射线波长；Z为原子序数；K对于不同元素同一名称的谱线是一个常数；σ对于同一谱线系的所有谱线也是个常数。根据莫塞莱定律，可以求出任何元素的各系特征谱线的波长，而且将实验所得的未知元素的特征X射线波长与计算值相比较，就能确定未知元素的原子序数Z。

母离子扫描 precursor ion scan 是串联质谱法中的一种扫描方式。用这样的方式可以检测生成指定碎片离子的所有先驱离子（母离子），从而追溯碎片离子的来源，能对产生某种特征碎片离子的一类化合物进行快速筛选。

母炼胶的鉴定方法 identification of masterbatch 一种或多种配合剂与生胶按规定比例混合而成的分散良好的一种配合料，是制备终炼胶或混炼胶的原料。使用母炼胶能简化加工并提高成品性能。在实际生产中，有些配合剂往往以母炼胶或膏剂的形式加入。鉴定母炼胶时，先对样品进行处理，如用溶剂溶解或清洗其表面，然后以红外光谱、化学方法等手段鉴定树脂性质和其他添加组分的成分及含量。例如鉴定日本产品DIAPOL 1808低温乳聚充油丁苯橡胶炭黑母炼胶时，先用合适溶剂溶解样品，对溶液进行红外光谱鉴定，确定其主要成分为丁二烯-苯乙烯共聚物和芳香烃油。取适量样品，明火燃烧，得到黑色残留物，该残留物经鉴定为炭黑，含量约为33%。再结合门尼黏度等其他指标，最后判断该样品为低温乳聚充油丁苯橡胶炭黑母炼胶。

木糖吸收实验 xylose absorption test 右旋木糖为五碳糖，口服后在小肠上段吸收，经血流由肾脏随尿排出，在体内不起变化。口服一定计量的木糖，测定一定时间尿中木糖排泄量，称木糖吸收实验，可以了解小肠的糖吸收功能。

穆斯堡尔谱 Mössbauer spectroscopy 通过无反冲条件下核γ射线的共振吸收谱研究物质微观结构的谱学技术。1958年由德国物理学家穆斯堡尔（R. L. Mössbauer）发现了原子核无反冲地发射γ射线并被同种原子核共振吸收的现象，因此获得了1961年诺贝尔物理学奖。原子核吸收γ射线后，由基态跃迁到激发态，受激态核退激发到基态时辐射γ射线，所辐射的γ射线对该放射性核是特征的，其能量ΔE相应于激发态与基态的能量差。在自由原子核的γ射线的发射与吸收过程中，原子核要受到反冲的影响，辐射能量的一部分变为放射性核的反冲能量，使共振吸收的几率极为微小。如果将发射与吸收γ射线的原子核置于它们的点阵晶格中，受点

阵晶格的束缚，可将反冲能量降到可以忽略不计时，有一定的几率实现γ射线的无反冲发射和同类核共振吸收，观测到穆斯堡尔效应。γ射线用闪烁探测器、正比探测器或半导体探测器检测。测谱时使放射源相对于吸收体以一定的速度往返运动，通过多普勒效应调制所发射的γ射线的能量的同时，测量γ射线的相对透射率，获得穆斯堡尔谱。它的能量分辨率特别高，是研究穆斯堡尔原子与周围环境超精细相互作用的有力手段。可用来研究原子核的基本性质、弛豫效应、金属和合金的电子结构、化学结构、原子配位、分子内结合状态、相变、辐射损伤等。由于^{57}Fe γ射线源的许多优点以及穆斯堡尔谱线的性质，穆斯堡尔谱特别适于研究含铁的磁有序材料。

穆斯堡尔效应 Mössbauer effect 穆斯堡尔效应是原子核无反冲地发射γ射线，并被同种原子核共振吸收的现象。作为γ射线源的原子核的反冲能量必须小于γ射线的自然线宽。假设作为γ射线源的原子核在晶体内，波耳兹曼常数为k，德拜温度为θ，γ射线的能量为E_0，原子核的质量为M，当满足条件$k\theta > E_0^2/Mc^2$（c为光速）时，可观测到共振吸收。能够观测到穆斯堡尔效应的元素共有40多种，最常见的是Fe。

N

内标法 internal standard method 内标法是常用的一种定量方法。在色谱分析中，内标法是将一定质量的纯物质作为内标物（参见**内标物**条）加到一定量的被分析样品中，然后对含有内标物的样品进行色谱分析，分别测定内标物和被测组分的峰面积（或峰高）及相对校正因子，按下列公式即可求出被测组分在样品中的质量百分含量

$$m_i = \frac{A_i f_i m_s}{A_s f_s m} \times 100\%$$

式中，m_i为被测组分的质量百分含量；A_i、A_s分别为组分和内标物的峰面积；f_i、f_s分别为组分和内标物的相对校正因子；m_s为内标物的质量；m为样品的质量。

在光谱分析中，为了使谱线强度由于实验条件波动而引起的变化得到补偿，通常用内标法，即采用分析线和比较线强度比对元素含量的关系来进行光谱定量分析。

内标物 internal standard 用内标法定量时，加入被分析样品中且以它为内标对未知组分进行定量计算的一种纯物质，称为内标物。要求是：内标物是原来样品中不存在的组分；纯度要高，既能和样品完全互溶，又不能有化学反应；内标物色谱峰和被测峰要靠近，但又能完全分离；内标物

的校正因子与被测组分的校正因子相近；加入内标的量要接近被测组分含量，称量时要准确。

内标线 internal standard line 在内标法中所选用的比较线称为内标线。内标线要求没有自吸或自吸很小，且不受其他谱线的干扰；用原子线组成分析线对时，要求两线的激发电位相近。若选用离子线组成分析线对，则不仅要求两线的激发电位相近，还要求内标元素与分析元素的电离电位也相近。用一条原子线与一条离子线组成分析线对是不合适的。

内标元素 internal standard element 在内标法中提供内标线的元素称为内标元素。内标元素的选择原则是其含量必须适量和固定；内标元素与被测元素化合物在光源作用下应具有相似的蒸发性质。

内啡肽 endorphin 由脑垂体产生的一类肽，具有镇痛作用。是可以与脑内的吗啡受体发生特异的结合而起类似吗啡作用的内生肽（吗啡样肽）的一种。含于动物的神经细胞中，被认为与脑啡肽一起参与神经传导。在无脊椎动物神经中也存在具有免疫学的同样反应的物质。

内锁 internal lock 被测试样中直接加入含控制锁场的核的溶剂等物质，二者互溶，均匀分布，置于磁场探头的同一位置，控制试样位置磁场的稳定性，控制精度高。缺点是操作较繁锁，因为每更换样品时必须重行锁场，调整匀场。通常，控制核用氘（^{2}D）核，因此场频联锁的这种系统称为氘锁。有的仪器还有^{7}Li锁或^{19}F锁。PFT-NMR 谱仪已普遍使用氘内锁。配制试样时最常用的溶剂或稀释剂是 $CDCl_3$（对有机物体系），D_2O（对无机物和强极性物质）。

内梯度 inside gradient 又称高压梯度。参见**高压梯度**条。

内向型受体 endo receptor 主客体分子识别中，一般将钻入结构中央的小分子称为客体，将其包围的一方称为主体或受体。为了实现识别，受体分子的官能团朝向内部客体分子的方向排列，因此称为内向型受体。

内重原子效应 internal heavy atom effect 在待测的磷光体分子中引入重原子取代基，例如芳香烃分子中引入杂原子或重原子取代基时，会产生重原子效应，导致磷光量子产率的提高。卤代芳烃随卤素原子序数的增加其磷光发射增强。这种重原子效应称为内重原子效应。利用内重原子效应进行磷光测定有时需要进行分子设计，通过合成在分子内引入重原子。

内转换 internal conversion; IC 受激分子的非辐射跃迁去活化过程的一种，指相同多重态的两个电子态（如 $S_2 \rightarrow S_1$，$T_2 \rightarrow T_1$）间的非辐射跃迁。内转换过程很快，在 10^{-13} s 以内发生。该过程与所涉及的两个电子态的最低振动能级间的能量差有关。能量差越大，速率常数越小。如$S_1 \rightarrow S_0$ 的速率常数约为 $10^{6} \sim 10^{12} s^{-1}$。

纳米电极 nanoelectrode 尺寸为纳米级的电极，呈现出不寻常的传质过程，乃至发生量子现象，带来许多

新的性质，集中反映在极高的传质速率和极高的分辨率两个方面，纳米电极适于高阻体系、超临界液体，固体甚至气体介质的研究，有利于异相和均相快速电化学反应研究，还可用在液/液界面的研究。

纳氏比色法 Nessler's colorimetric method 一种测定糖精含量的方法。在碱性条件下，糖精与碘化汞和碘化钾的复盐（$HgI_2 \cdot 2KI$）反应生成黄色的化合物。颜色的深浅与糖精钠含量成正比关系，用比色法测定糖精含量。

钠泵 sodium pump 神经元膜上的主动转运系统，能逆浓度将钠离子泵出细胞。依赖钠泵的作用才能维持产生膜静息电位所需的离子分布。

耐候性 weathering resistance 材料耐大气腐蚀的能力。

耐蚀性 corrosion resistance 腐蚀体系中材料抗腐蚀的能力。

难熔金属碳化物涂层石墨管 graphite tube coated with refractory metal carbide 是在普通石墨管内壁涂覆一层 Ta、Zr、La、W、Mo、Ti 等难熔金属的石墨管。涂覆的方法有两类，一种是将难熔元素的盐类溶液或其氧化物悬浮液注入石墨管内，再在原子吸收光谱仪器上加热处理，难熔元素与石墨管表面反应生成难熔碳化物涂层；另一种方法是将石墨管浸渍于难熔元素盐类溶液中，然后再进行加热处理，在石墨管内壁形成难熔碳化物涂层。所生成的 TiC、ZrC、HfC、VC、NbC、TaC、MoC、WC 等碳化物为间充型碳化合物，碳原子填充到密堆积的金属原子结构八面体的空穴内，特点是高硬度，高熔点，致密、呈化学惰性，但在高温下易与氧、氮、CO_2 反应，造成较强的还原气氛，有利于改进铍、铝、稀土元素、硅、锗、锡、磷、砷、硼的原子化。

能带结构 band structure 原子的价电子，在晶体中成为共有化电子，产生能级分裂而形成的带状结构。能带结构决定了很多物体的基本特性，如电导性、磁学特性、光学特性、光电特性、晶格常数和弹性等。可以通过 XPS 的价带谱以及 UPS 来进行测定。

能级 energy level 按照量子力学的概念，原子的能量状态是不连续的。这种不连续的能态称为能级。

能级交叉机理 level cross mechanism 当生成单重态或三重态自由基对时，因为未偶电子间的交换相互作用（$J \neq 0$），三重态和单重态的能级会裂分（参见**自由基对机理**条）。理论上可以证明，此时若无外磁场，即使$A \neq 0$（自由基对内存在超精细耦合作用），也不发生单重态 $|S\rangle$ 与三重态（$|T_{-1}\rangle$、$|T_0\rangle$、$|T_{+1}\rangle$）的混合（参见**超精细耦合机理**条）；但随着外磁场强度的增加，三重态能级的塞曼裂分增大，在某一特定磁场下，$|S\rangle$ 与 $|T_{-1}\rangle$（或 $|T_{+1}\rangle$）能级发生交叉，两者发生混合，即在特定磁场下单重态与三重态的系间窜跃速度增大。这就是

能级交叉机理，主要用于解释化学反应的磁场效应。

能见度测定方法 visibility determination methods 一般指水平能见度。水平能见度是指视力正常的人在当时天气条件下，能够从天空背景中看到和辨认出的目标物（黑色、大小适度）的最大水平距离，夜间则是能看到和确定出的一定强度灯光的最大水平距离。所谓"能见"，在白天是指能看到和辨认出目标物的形体和轮廓，在夜间是指能清楚地看见目标灯的发光点。凡是看不清目标物的轮廓，分不清其形体或者所见目标灯的发光点模糊，灯光散乱，都不算能见。水平能见度的测定是在观测地点四周不同方向、距离上选若干固定目标物，根据这些目标物能见与否及其清晰程度来确定观测时的能见度。

能量单色器 energy monochromator 在表面分析中获得能量均一的粒子束的一种装置，是现代高性能仪器最重要的部件之一。对于带电粒子可以采用在磁场或电场中偏转的方式而达到能量单色的目的。对于X射线则可以通过晶体色散的方法进行能量单色化。

能量分辨率 energy resolution 衡量谱仪能量分辨能力的一项重要指标。在不同学科中其含义有所不同。在能量色散型X射线分光计中，是指检测器将两条不同波长的谱线分开的能力。当平均光子能量为E的两条谱线恰能被分开时，如果两条谱线的光子能量差为ΔE，则能量分辨率的表达式为$E/\Delta E$，此值越大，说明X射线分光计将不同波长谱线分开的能力越强。在实际工作中，能量分辨率用公式$\frac{V_1-V_2}{W_{\frac{1}{2}}}$算出，式中，$V_1$和$V_2$分别为两个脉冲幅度分布的峰值电压，而$W_{\frac{1}{2}}$为脉冲幅度分布的半高宽（单位均为伏特）。有时也用一个脉冲幅度分布的半高宽$W_{\frac{1}{2}}$与该分布的平均电压V_{av}之比值，即$\frac{W_{\frac{1}{2}}}{V_{av}}$来表示能量分辨率，两项的单位都是伏特，一般表示为百分率。用此定义则数值越小，能量分辨率越高。在电子能谱仪中，是指电子能谱仪能量分辨的能力，通常用$\frac{\Delta E}{E_0}$来表示，ΔE为一单色电子束通过能量分析器后能量分布曲线的半宽，E_0为分析器所调定的能量，即单色电子束的能量。

能量分析器 energy analyzer 表面分析仪器中用于精确测定电子结合能的部件，是谱仪的核心部分。早期能谱仪采用的大都是磁偏转式能量分析器，由于操作上不便，并且对环境磁场特别敏感，已逐渐被淘汰。目前绝大多数谱仪都采用静电式偏转型分析器。其基本原理是电子在一定电场中偏转，当固定电场强度后，只有某一能量的电子可以通过，对电场强度进行扫描就可以使不同能量的电子通过进行检测。分析器的外部用一种金属进行磁屏蔽，以避免被分析的低能电子受杂散磁场影响而偏离原来的轨道。静电式偏转型能量分析器有以下

四种主要的形式：127°圆柱偏转器，半球形偏转器、平行板反射式，筒镜式能量分析器。

能量色散法 method of energy divergence 在X射线微区分析仪中一种将X射线按波长进行色散的分析方法，又称脉冲幅度分析法，是能谱分析法的一种。即将能量范围很宽的X射线，经能量色散后，用一个探测器接收，进而转换成与入射X射线能量成正比的输出信号，根据不同元素所辐射的X射线光子能量不同来鉴别元素的方法。各元素在激发源产生的高能辐射作用下，产生能量各异的特征X射线，这些X射线光子不需预先经过晶体分光，直接用探测器接受后由脉冲高度分析器加以区别，就可以鉴别元素。

能量色散X射线荧光光度计 energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry 一种X射线荧光光谱仪。检测器同时接受样品中所有元素发射的X射线荧光，检测器每接受一个入射的X射线光子，就产生一个高度正比于此光子能量的电流脉冲。检测器的输出经过放大，再通过脉冲高度分析器处理，将对应于不同波长的脉冲分开，选定适当的工作参数，就可以确定待测元素特征谱线的波长和强度。由于不需要准直器和色散元件，检测器和样品之间的距离可以减小到最低限度，同时也增大了检测器接受样品荧光的立体角，与波长色散型仪器相比尽管波长分辨率较差，但测得的荧光强度可以成百倍地增强。

能量色散X射线荧光光谱法 energy diverged X-ray fluorescence spectrometry 根据X射线光量子能量与脉冲高度成正比的特性，通过脉冲高度分析器进行分析的方法。分析步骤包括采谱参数设定、采谱、谱处理、标准化和定量数据处理等。

能量转移化学发光 energy transfer chemiluminescence 一般认为发光共振能量转移是发光给予体和发光接受体偶极-偶极相互作用的结果。给予体分子被激发后，当接受体分子与给予体分子相距一定的距离（一般为2～5nm），且给予体和接受体的基态及第一电子激发态两者的振动能级的能量差相互适应，处于激发态的给予体将一部分或全部能量转移给接受体，使接受体被激发。在整个能量转移过程中，不涉及光子的发射和吸收。如果接受体的发光量子产率为零，则发生能量转移，发光熄灭，如果接受体也是一种荧光发射体，则表现为接受体的发光，这种化学发光称为能量转移化学发光。

能量转移技术 energy transfer technique 分子中若存在两个不同的、相互紧靠的荧光部分，其一的荧光光谱与另一的吸收光谱有较大的重叠时，分子的能量可从其一荧光部分向另一荧光部分转移。基于这一原理，将抗原和抗体分别标记两种不同的荧光标记，经抗原-抗体反应，生成含两个荧光部分的结合物，当激发抗原时由于产生能量转移，观察到的是抗体部分的发光。发射波长发生位

移，游离型体抗原（或抗体）不干扰测定。因此，可不经抗原-抗体的结合型/游离型分离，就能准确测定生物样品中的抗原（药物）的含量。

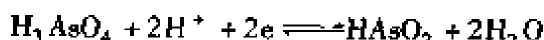
能斯特方程 Nernst equation 描述电极的平衡电势与电极反应各组分活度关系的方程式。由德国化学家能斯特（1864～1941）于1889年提出，为纪念他对电化学热力学的贡献而得名。对于一般氧化还原反应



$$Ox + ne \rightleftharpoons Red,$$

$$\varphi = \varphi^{\ominus} + \frac{RT}{nF}\ln\frac{a_{Ox}}{a_{Red}}$$

式中，$\varphi^{\ominus}$为参加反应各物质皆处在标准态（其活度为1）时的电势；R为理想气体常数，其值为8.314J·K·mol^{-1}；T为热力学温度，单位为K；n为电极反应中得失电子数目；F为法拉第常数；a_{Ox}和a_{Red}分别为氧化态Ox和还原态Red在溶液中的活度，若电对中出现金属、固体、溶剂时，其活度取1；若在该电极反应中还有其他物质参与或生成，则其活度亦应表示在Nernst方程式中。例如



$$H_3AsO_4 + 2H^+ + 2e \rightleftharpoons HAsO_2 + 2H_2O$$

$$\varphi = \varphi^{\ominus} + \frac{RT}{nF}\ln\frac{a_{H_3AsO_4} \times a^2_{H^+}}{a_{HAsO_2}}$$

能斯特方程表述的是电极反应的热力学关系，是电化学中最基本的关系式之一。能斯特方程只能用在可逆反应体系。根据能斯特方程，可由标准电极电势表及溶液的活度、温度等计算出电池的电动势。

能斯特分配定律 Nernst's distribution law Nernst在1891年提出了有名的分配定律：当某一溶质在基本不相混溶的两种溶剂中分配时，在给定的温度下两相达到平衡以后，若溶质在两相中的分子量相等，则其在两相中的浓度的比值为一常数。以公式$A = \frac{[A]_2}{[A]_1}$表示，式中$[A]_1$和$[A]_2$分别表示达到平衡后溶质A在溶剂1和2中的浓度。A在给定温度下是一常数，称为能斯特分配平衡常数，即浓度分配平衡常数。

拟合优度 goodness of fit 回归线（或回归方程）拟合好坏的程度。在回归分析中，所建立的回归线是否有意义，是通过回归平方和

$$Q_R = \sum\ (Y_i - \bar{y})^2$$

对残差平方和$Q_E = \sum(y_i - Y_i)^2$的统计检验来确定，检验统计量

$$F = (n-2)\frac{Q_R}{Q_E}$$

式中，n是建立回归线的试验点数目。若由实验值计算的F大于显著性水平α与自由度$f = n-2$时的临界值$F_{\alpha,f}$，则判所建立的回归线是有意义。因为Q_E中既包括了实验误差效应平方和Q_e，又包括了除被研究的因素x之外的其他因素以及x对响应值y的非线性影响产生的平方和Q_d，因此，一条在统计上有意义的回归线不一定是拟合最优的回归线。当每一个试验点进行了重复测量时，可以从Q_E中将表征回归线拟合优度的Q_d和实验误差效应平方和Q_e分解出来，再将Q_d对Q_e进行统计检验。如果其他因素以及x对y的非线性影响可以

忽略不计，$Q_d \to 0$，说明不存在失拟情况，能通过统计检验，即回归线的拟合是最优的。

拟合优度检验 goodness of fit test 对回归线线性拟合优劣程度的检验。检验统计量

$$F = \frac{\frac{Q_d}{f_d}}{\frac{Q_e}{f_e}}$$

式中，$Q_d = \sum p\ (\overline{y}_i - Y_i)^2$ 和 $Q_e = \sum\sum(y_{ij} - \overline{y}_i)^2$ 分别是失拟平方和与实验误差效应平方和；$f_d = n - 2$ 与 $f_e = n(n-1)$ 分别是失拟自由度与实验误差效应自由度；n 是建立回归线的试验点数目；p 是在同一实验点重复测量次数；y_{ij} 和 $\overline{y}_i$ 分别是对应于 x_i 的响应值及其平均值；Y_i 是由回归线计算的响应值。当由实验值计算的 F 小于给定显著性水平 α 与相应自由度的临界值 $F_{\alpha,(f_d,f_e)}$，说明不存在明显的失拟情况、不存在 x 对响应值 y 的非线性影响，回归线线性良好。通过拟合优度检验可以正确地确定回归线的线性范围。

拟水平 pseudo-level; dummy level 虚拟的因素水平。在正交试验设计中，有时没有现成合适的因素水平数的正交表可供使用，或为保持所需要的因素水平数有困难时，常将水平数较少的因素的某个或某些水平重复设置，以使因素水平数与所选用的正交表所需要的水平数相等。这些重复设置的水平只是形式上的水平，故称为拟水平。

逆胶束增强荧光法 reversed micelle enhanced fluorescence 表面活性剂在有机溶剂等非极性溶剂中会形成极性头朝内、疏水部分朝外的逆胶束。某些荧光体在逆胶束中具有较高的荧光强度和荧光寿命，利用逆胶束介质来提高荧光分析的灵敏度、阻止其他分子对荧光的猝灭，改善分析性能的方法称为逆胶束增强荧光法。利用逆胶束的增溶作用还可以克服试剂与被分析物溶解度不同的难题。胶束以及逆胶束是荧光分析中使用频率较高的一类介质。

逆拉曼效应 inverse Raman effect 只有当一个系统同时被频率为 ν_0 的巨脉冲激光束和覆盖从 ν_0 到 $\nu_0 + 3500\mathrm{cm}^{-1}$ 宽范围连续光照射，才会在 $\nu_0 + \nu_k$ 范围观察到吸收线，ν_k 是对应于系统中某一个拉曼活性振动的频率，此外还发射频率为 ν_0 的光，这就是逆拉曼效应。逆拉曼效应有望成为研究短寿命物质的一种技术。

逆流动注射分析 flow reversal FIA 在不对反应流路做任何改动，首先使试样塞直接进入分散管中，然后借助于流向的改变进入检测器，从而使 FIA 系统中的试样塞在注入点和检测点之间流经很长的有效管道长度。把反应管道长度作为连续变量，又能保持相同的载流组成、流速和试样。为更彻底地自动优化和获取更多的信息提供了可能。

逆流色谱法 counter-current chromatography; CCC 基于样品在两个互不相溶的溶剂之间的分配作用的液相

色谱技术。它的原理和液-液萃取分离相似，只不过液-液萃取是通过有限的几次不连续萃取操作，使分配系数相差较大的两个组分相互分离，而逆流色谱则通过适当的仪器进行复杂的机械运动使两互不混溶的液相作相对移动，而分配系数相差甚微的样品组分在连续的萃取过程中达到分离。逆流色谱在天然产物分离与制备领域应用较多。

逆流色谱仪 counter current chromatograph 是一种不用任何固体基质的液-液分配色谱仪。它根据流体力学原理，使溶质在物理性质（密度、黏度和表面张力）不同的两液相中实现对流分离。因为它不使用固定相载体，所以不会发生样品的吸附、玷污和变性等问题，使分离样品的纯度高、回收率高，而且容易实现实验室制备量级的分离纯化。同时，对样品的预处理要求也可大大降低，适合于组成复杂的样品的中间或最终纯化制备。

逆向翻译 reverse translation 一种分离基因的技术。其原理是：根据已知的蛋白质序列推断相应的核酸序列，再根据此制备寡核苷酸探针，与DAN（包括cDAN）或mRNA进行杂交，从而筛选出相应的基因片段或mRNA。

逆向脉冲极谱法 reverse pulse polarography；RPP 与常规脉冲极谱的扫描方向相反，起始电位维持在相当负的值，即在极限扩散控制的电位区域，加正向脉冲，使加入脉冲的电位越来越正，记录得到逆向常规脉冲极谱图的方法。该方法可用于研究电极过程机理，特殊的分析化学应用如有机卤化物的测定。

黏度检测器 viscosity detector 一种根据淋出液黏度与分子量的关系制作的凝胶色谱检测器，常用的是玻璃或不锈钢毛细管黏度计。因为高分子溶液的黏度与其浓度相关，不同黏度的高分子溶液通过毛细管的时间和在毛细管中产生的压力降不同，通过测定柱流出物通过毛细管的时间或压力降就可以检测和定量高分子化合物。检测黏度有间歇式和连续式两种方法。玻璃毛细管黏度计是通过其虹吸管间歇地吸取一定体积的柱流出物，测定其流经毛细管的时间，根据经典方法计算特性黏度。不锈钢毛细管黏度计是通过其压力传感器，连续地测定柱流出物流经毛细管时的压力差来计算黏度。黏度检测对温度和流速稳定性的要求非常高。它除了测定分子量以外还可以研究聚合物分子的支化问题。

尿卟胆原定性实验 urine porphobilinogen qualitativetest 取新鲜尿液数毫升和等量Ehrlich试剂混合，再加2ml饱和乙酸钠，再加入氯仿数毫升，充分混匀。如水层显红色，氯仿层无色即卟胆原阳性；如水层无色则为阴性。

尿素 urea 是肝脏在经鸟氨酸循环过程中形成的产物，由肾脏排泄，一旦肾功受损害，尿素排出量减少，血中尿素增加。正常成年人血清参考

值为1.8～7.1mmol·L^{-1}。通过测定血中尿素可了解肾小球滤过功能情况。

尿素传感器 urea sensor 通常是将尿素氧化酶固定于信号转换器表面，根据酶分子对底物分子识别反应的特征，结合一定的转换器如电化学电极、热敏电阻、FET、光化学手段等构置出相应的各类尿素传感器。

尿缩指数 concentration index of urine 尿液渗透量与血浆渗透量之比。可直接反映血浆通过肾脏时水被重吸收的能力，其中渗透活性溶质被浓缩的倍数，称为浓缩指数。

凝固酶试验 coagulase test 测定某一细菌株是否产生凝固酶的一类试验。它可以区别致病性、金黄色葡萄球菌和非致病性金黄色葡萄球菌，通常是用加抗凝剂的兔、猪或人的血浆和被测细菌培养物（38℃，24h）混合后连续观察6h，每小时观察一次，在此时间内如出现凝块，即属阳性反应。如用玻片法，则应在5s，即出现凝集。测试时必须同时做阳性和阴性对照。

凝集 agglutination 红细胞、细菌等颗粒性抗原与特异性抗体反应时形成肉眼可见的凝块为凝集。这是由于抗体分子与相邻抗原颗粒上抗原决定簇之间架起了桥，形成了多个抗原、抗体相互联接的凝块。因为凝集易观察，所以是许多血清学试验的基础。

凝胶过滤色谱 gel filtration chromatography；GFC 又称水系凝胶色谱。是以水或缓冲溶液作流动相的凝胶色谱。水溶性高分子化合物的分离采用这种体系。

凝胶内体积 gel inner volume 凝胶色谱柱中填料孔隙内溶液的体积。

凝胶色谱法 gel chromatography 又称体积排斥色谱、空间排阻色谱、分子筛色谱等。是以化学惰性的多孔性物质作固定相，溶质分子不是与固定相发生相互作用，而是受固定相孔径大小的影响而达到分离的一种液相色谱分离模式。比固定相孔径大的溶质分子不能进入孔内，迅速流出色谱柱，不能被分离。比固定相孔径小的分子才能进入孔内而产生保留，溶质分子体积越小，进入固定相孔内的几率越大，于是在固定相中停留（保留）的时间也就越长。凝胶色谱法主要用于有机高分子化合物的分离和分子量分布的测定。

凝胶色谱仪 gel chromatograph 专门用于测定有机高分子化合物的分子量和分子量分布的液相色谱仪。它与普通液相色谱仪的不同之处是它所用的色谱柱是多孔惰性填料，它所用检测器则主要是适合高分子有机物检测的示差折光检测器、光散射检测器和黏度检测器。

凝胶渗透色谱 gel permeation chromatography；GPC 又称非水系凝胶色谱或亲脂凝胶色谱。是以能溶解非交联和非凝胶型聚乙烯以及其他高分子的有机溶剂作流动相的凝胶色谱。主要适合于非水溶性（脂溶性）高分子的分离。

凝胶树脂 gel resin 一种孔径较

小或在干状态下孔径较小的合成树脂。指在溶剂中凝胶溶胀形成一种互相交联的高分子链段组成的网络孔在干燥时收缩形成紧密堆积的高分子聚合物。根据凝胶的材料来源可以分成有机和无机凝胶两大类。根据制备方法又可分为均匀、半均匀和非均匀三种，这种分类主要反映了凝胶孔结构的差异，均匀凝胶由于结构的均匀而呈透明状，半均匀凝胶呈乳白色半透明状，非均匀凝胶呈白色不透明状。

凝胶外体积 gel interstitial volume 凝胶色谱柱中填料颗粒与颗粒之间的溶液体积，不包括填料孔隙内溶液的体积。

凝胶柱 gel column 是以凝胶性填料填充的用于凝胶色谱分离的色谱柱。凝胶按化学组成可分为有机和无机凝胶，按机械强度可分为硬质和软质凝胶。

凝聚相干扰 condensed-phase interference 亦即挥发干扰，对分析元素离开石墨表面挥发进入气相的所有影响。包括热预处理时分析元素的损失，形成碳化物和夹杂化合物，以及导致原子化不完全的其他类似过程，如凝聚和再挥发。石墨管表面改性，如热解涂层、金属碳化物涂层和石墨管内衬金属箔等，使样品仅分布在石墨管的表面，防止样品渗入石墨影响分析元素的挥发。应用基体改进剂使干扰组分转化为易挥发的化学形态或将待测元素转化为更加稳定化学形态，是克服此种干扰的有效方法。

凝乳状沉淀 coagulating-emulsion precipitation 见晶形沉淀条。

凝血酶原 prothrombin 又称凝血因子Ⅱ。是一种糖蛋白，由579个氨基酸组成，含10个γ-羧基谷氨酸，分子量为72000。在肝脏合成，需依赖维生素K。血浆含量为0.15～0.2g·L^{-1}，生物学半寿期为60h。存在于血浆中，被凝血酶原酶激活后转变为凝血酶。

凝血酶原酶 prothrombinase 由因子Xa、Va、Ca^{2+}和磷脂（PF3）组成的复合物，起丝氨酸蛋白水解酶作用，使凝血酶原转变为凝血酶。参与共同途径的凝血过程。

凝血因子 coagulation factor 现知经典凝血因子共12个，激肽释放酶原（PK）和高分子量激肽原（HMWK）也参与凝血过程。除因子Ⅳ（Ca^{2+}）外，其余均为糖蛋白，故也称凝血蛋白；除因子Ⅲ（组织因子）外，其余均存在于新鲜血浆中，故又称血浆凝血因子。

凝血因子活性测定 determination of coagulation factor activity 采用凝固法（一期法和二期法）或发色底物法测定，并与标准曲线作比较，便可得出受检者的结果。正常参考值大致为50%～150%。凝血因子血浆水平的高或低，分别反映凝血功能的亢进或减退。

牛奶中脂肪含量测定 determination of fat in milk 牛奶中含脂肪约3%～5%，其中97%～98%为甘油三酸酯。牛奶脂肪的相对密度为0.935～0.943，融点为28～38℃，凝

固点为 15～25℃，可根据这些性质指标评定牛奶的质量。脂肪含量测定方法主要有罗紫-哥特里 Röse-Gottlieb 法、巴布科克 Babcock 法、盖勃(Gerber)氏法、索氏抽提法等。

扭辫分析 torsional braid analysis; TBA 该法将试样涂覆于一根丝辫上，测量自由衰减扭转振动和温度关系的一种技术，这是一种特殊条件下的动态热机械法。丝辫由细玻璃纤维扭织而成，其形状是不定的，但间隙较多，可浸渍大量液体试样，以提高测量精度。该法主要用于研究聚合物的力学性能，广泛应用于单体聚合、溶液的干燥固化、热分解等高分子化合物的研究中。

扭曲分子内电荷转移 twisted internal charge transfer; TICT 同时含吸、推电子基团的给体-受体结构的分子，在激发态时通过扭曲 90°可以实现最大限度的电荷分离，这种扭曲后电荷转移的状态称为 TICT 态。由于 TICT 激发态极性较局部激发态极性高得多，因此在极性溶剂中常常可以观测到 TICT 态荧光。同时 TICT 激发态对客体分子的加入很敏感，利用"TICT 荧光的开-关"效应可以实现对客体分子的识别。TICT 荧光还可用于微环境极性的检测等。

扭旋振动 torsional vibration 也称扭转振动。是一种面外弯曲振动，分子中一部分原子通过单键相对于另一部分原子产生有限转动所形成的振动。在绕单键的转动中，运动受位垒所制约。若分子位垒高度大于 kT (k 为波尔兹曼常数，T 为热力学温度)，则存在不同异构体；若位垒高度低于 kT，则可自由旋转；而位垒高度接近 kT 时，则从一种稳定态很快转换到另一种稳定态，这时分子中一部分原子可相对于另一部分原子做有限的旋转。它能量较小，仅出现在 200cm^{-1} 以下的波段。质量和结构的变化对其频率位置的影响较小，用以区分某些基团在此波段内产生的弯曲振动吸收。

扭转振动 twisting vibration 见弯曲振动条。

农产品分析 analysis of agricultural products 广义的农产品包括农作物、畜产品、水产品和林产品，狭义的农产品则仅指农作物和畜产品。农产品分析通常指狭义而言，主要是为了评定农产品的品质、各营养成分的含量、有无变质或毒物污染等，以保证农产品的质量。

农药 pesticide 农业上用于防治病虫害以及调节植物生长、除草等的药剂。根据防治对象，可分为杀虫剂、杀菌剂、杀螨剂、杀线虫剂、杀鼠剂、除草剂、植物生长调节剂等。根据原料来源可分为有机农药、无机农药、植物性农药、微生物农药和昆虫激素等。根据加工剂型可分为粉剂、可湿性粉剂、可溶性粉剂、乳剂、乳油、浓乳剂、乳膏、糊剂、胶体剂、熏烟剂、烟雾剂、油剂、颗粒剂、微粒剂等。大多数是液体或固体，少数是气体。根据害虫或病害的种类以及农药本身物理性质的不同，

采用不同的施用方法，如制成粉末撒布，制成水溶液、悬浮液、乳浊液喷射，或使成为蒸气或气体熏蒸等。

农药安全评价 safety evaluation of pesticide 包括农药环境安全评价和农药卫生毒理安全评价两部分。环境安全评价是通过各种室内模拟实验和田间试验方法探明和评估农药对环境和非靶标生物的安全性与危害性，为新农药的合理使用和防止农药污染提供科学依据。其评价方法分为两个阶段，即新农药开发的安全性预评价和农药使用后的安全性现状评价。农药卫生毒理安全评价是以动物实验资料外推和对人的直接观察资料，预测某一农药对接触人群的危险性。主要根据其理化性质、动物实验及人体观察资料进行定性和定量的全面评价，同时也应考虑其用途、接触人群的多少、公众利益、经济利益等来权衡利弊综合分析，提出禁用、限用、安全使用或预防措施的建议。

农药标准品 standard sample of pesticide 在农药分析中作为参比物质，用于确定同种农药量值的高纯度原药。在国际农药分析协作委员会(CIPAC)的《准则》中，将农药分析中参比物质分为两类：(1)基准参比物，是高纯度的、对各项特性有详细描述的合格参比物；(2)工作标样，是经纯化的、用于日常分析工作的参比物。基准参比物和工作标样都可使用纯度较高的工业品原药，经纯化制得；或使用纯化的原料和中间体制备原药，再进一步纯化制得。

农药残留 pesticide residue 农药使用后残存于生物体、农副产品和环境中的微量农药原体、有毒代谢物和杂质的总称。残存的数量称作农药残留量，单位用 $mg \cdot kg^{-1}$ 表示。各国均制定了农药在农产品和食品中的最高允许残留量的标准，如果超过最大残留限量就会对人畜产生不良影响或通过食物链对生态系中的生物造成毒害，这种危害称为农药残留毒性，简称残毒。世界各国在农药管理法规中要求生产企业在新农药申请登记时提出详细的残留试验资料，一般应包括日允许摄入量、最大残留限量、残留动态、农药残留半衰期、安全间隔期和在作物上的最终残留量等资料以及相应残留物分析方法。研究农药残留的最终目的是通过科学合理用药以减少对环境的污染及对人类和生态系的不良影响。

农药残留半衰期 half-life of pesticide residue 指农药残留分解消失至原始药量一半所需的时间。通常从残留动态曲线上求出农药降解一半的天数为半衰期，用它衡量农药在自然界中的稳定性和持久性，一般以农药在作物上和土壤中的半衰期表示。农药残留半衰期与其本身的物理化学性质有关，还与施药方式和环境条件有关，所以它只能代表在某一特定条件下农药的消解能力。

农药残留动态 dynamic of pesticide residue 施药后残留农药逐步降解和消失的趋势。农药残留除受其本身的理化性质、使用方法、施药时期的影

响外，还与土壤、作物的类型和性质及环境条件有关。残留动态是这些因素综合作用的表现。在作物、土壤中的农药残留是随天数增加而不断消减，可根据不同天数的实验结果得出残留动态的曲线。根据该曲线可了解农药的消解速度和残留动态，计算其安全间隔期和半衰期，了解施药至收获时农药残留的消长，预测农药残留行为，指导安全合理使用农药。

农药残留法典委员会 the codex committee on pesticide residue；CCPR 由联合国各成员国组成、每年各国政府派出代表团举行一次年会。对国际贸易中农药在食品和饲料中最高残留限量取得协调一致的意见，最后提交食品法典委员会审定通过，使之成为国际间能够共同遵守的公平的国际标准。该机构除各国政府代表团外，还有一些著名的国际机构组织，如国际农药企业联合会（GIFAP）、国际公职分析化学家学会（AOAC）、国际纯粹与应用化学联合会（IUPAC）、国际标准化组织（ISO）、国际化学品安全评价组织（IPCs）等参加会议。CCPR 机构的主要工作包括：(1) 制定农药在食品和饲料中最高残留限量（包括再残留限量）和指导性残留限量；(2) 审议农药残留专家委员会提交的最高残留限量草案；(3) 对食品和动物饲料进行商品分类；(4) 推荐农药残留分析和取样方法；(5) 制定农药残留和毒理学评价的优先表；(6) 促进和推荐世界各国接受 CCPR 制定的最高残留限量，以及制定有关农药残留专业术语的定义。

农药残留分析 pesticide residue analysis 对微量农药残留进行的定性和定量分析的过程。目的是为了评价农药残留的危害性，保障人体健康，防止环境污染。农药残留分析有以下两方面内容：(1) 残留试验和残留分析，为新农药开发登记提供其在作物上的残留动态和最终残留资料，用于制定农药最大残留限量和合理使用准则；(2) 农药残留监测，为评价农药对农畜产品和环境的污染和制定防治措施提供依据。

农药残留量生物测定 bioassay of pesticide residue 在控制条件下通过测量农药对敏感指示生物（动物、植物、微生物）的死亡率（或抑制率）、生长率等生理指标来确定其残留量的生物测定方法。所用指示生物因农药种类而不同，除草剂及生长调节剂采用高等植物或藻类，杀菌剂用微生物，杀虫剂多用昆虫作物为指示生物。此方法必须具备两个条件：(1) 指示生物对农药的反应程度与剂量呈正相关；(2) 反应结果易于观察和测量，且具有良好的重复性。此方法具有经济简便、不需昂贵设备、可直接反映农药的残效、测定结果更接近实际情况等优点。缺点是特异性差，只能测出对指示生物的活性。

农药残留田间试验 pesticide residue field trial 为农药登记和制定农产品中的农药最大残留限量标准或制

定农药合理使用准则，提供残留资料而设计进行的室外（或模拟）试验。在农药登记、制定最大残留限量（MRL 值）和农药合理使用准则的各项技术指标时，均以农药在农作物、土壤、水中的消解动态和实际残留水平等各项残留评价资料作依据，而这些资料都是从农药残留田间试验或模拟试验获得的。科学、合理、规范化的试验对提供足够数量和具有充分代表性残留分析样本的基础，也是取得完整残留评价资料的保证。农药残留田间试验要求一个农药制剂在一种农作物上使用，必须在两个以上代表性产区进行两年以上的重复试验，试验内容主要包括：供试农药在试验作物、土壤、水中的消解动态试验，以评价其残留消解速率；不同施药量、不同施药次数、不同间隔期、不同施药方法等与采收时的作物、土壤、水中农药残留量关系试验，以评价在各种不同条件下，实际农药残留量水平。

农药残留物分析 pesticide residues analysis 指水体、土壤和作物中残存的各种无机农药及有机农药的分析检测。农药残留量检测方法是否符合要求和可行，主要以方法的检出限、准确度和精确度作为重要的衡量指标。它根据检测目的，待测物和样本种类不同而要求不同，若检测某食品中农药残留的目的是为了与规定的最大残留限量（maximum residue limit，MRL）比较，以判断是否超标决定能否投入市场，则要求最低检出浓度应低于 MRL 值一个数量级（10 倍）即可。若规定的 MRL 值很低时，则最低检出浓度至少应与 MRL 相同。如果检测目的是研究某农药在食品、饲料、土壤、水和大气中污染程度以及消解规律等，则要求的最低检出浓度要低得多，才能得出有规律的检测数据，以便统计分析做出结论。

农药残留专家委员会联席会议 joint meetings of the FAO panel of experts on pesticide residues and the environment and the WHO expert group on pesticide residues; JMPR 创始于 1962 年。每届 FAO/WHO 农药残留专家委员会由联合国粮农组织和世界卫生组织总干事在国际范围内聘请 6～7名专家组成，每年举行一次会议，其中成员按当年农药评议优先表中的品种，仅从学术上对各国政府部门及国际农药企业联合会中各大农药制造公司所提供的根据良好农业措施以及良好的实验室操作规范所取得的残留实验数据，市场食品安全性普查监测中所取得的残留数据，进行消费危险性和安全性研究和评价，制订出一系列有关农药最高残留限量。对残留分析和取样方法，农药代谢途径及其代谢产物和农药在环境中残留状况做出评价，对农药残留专业术语做出定义。世界卫生组织系统的残留专家就农药的毒理学试验数据，对农药的三致性（致畸、致癌、致突变）等方面做出评价，制订出有关农药的每日允许摄入量及其他有关农药残留毒性指标，一并提交农药残留法典委员

会全体会议讨论。在国际上JMPR在农药残留综合性评价及有关农药残留专业术语定义方面具有权威性，其研究评价工作文本汇总后每年作为联合国出版物出版，如农药残留评价报告集，农药残留评价文本，农药残留毒理学评价文本。

农药代谢 metabolism of pesticide 农药在生物体内外由酶催化的反应。按生物对象可分为动物、植物、微生物代谢，其中动物代谢可用活体和离体试验；按代谢过程可分为初级代谢和次级代谢；按化学反应类型可分为氧化反应、水解反应、还原反应和轭合反应。研究农药代谢的目的在于弄清农药对靶标生物的作用机理以及抗药性和选择性的关系、研究对非靶标生物的影响以评价农药的安全性，以及为创制新农药提供线索。

农药的土壤吸附作用 soil adsorption of pesticide 土壤吸附力使农药聚集在土壤颗粒表面，致使土壤颗粒与土壤溶液界面上的农药浓度大于土壤整体中农药浓度的现象。因引起吸附原因的不同分为物理结合、静电结合、氢键结合、配位键结合等四种主要形式。影响土壤吸附农药的能力，与土壤和农药的性质及其相互作用时的条件有关。土壤对农药的吸附能力的大小，通常用吸附系数 k_d 和土壤吸附常数 k_{oc}来表示。

农药地下水污染 groundwater contamination of pesticide 地下水中农药残留的浓度达到一定程度并足以对人类和环境造成危害的现象。许多国家和组织制定或修订了地下水中一些农药的限量标准。造成地下水污染的原因较复杂，其来源主要是农业生产中大量施用农药，生产、储藏、运输、销售等环节的泄漏，以及不当废弃物等。农药通过土壤淋溶等作用和其他诸多因素，如农田排水、水库、废井等，而到达地下水中。农药对地下水污染的原因与农药的性质、施药、地区气候、水文地质和土壤性质等因素有关。

农药轭合残留 conjugated residue of pesticide 农药轭合物是由带有羟基、羧基、巯基和氨基等活性基团的母体化合物或其代谢物与生物体内的葡萄糖、葡萄糖醛酸、氨基酸、谷胱甘肽、硫酸酯等在酶催化下结合形成的。在植物体内，轭合物以各种类型的糖苷，如葡萄糖苷、*N*-葡萄糖苷、*S*-葡萄糖苷、龙胆二糖苷、核糖苷等以及谷胱甘肽、氨基酸轭合物较为常见。而在动物体内，则主要形成葡萄糖醛酸轭合物和硫酸酯轭合物。轭合物的形成反应可看作是生物体对农药的解毒行为，生物活性极低，且极性大、溶于水，易于从动物体内排出。轭合物的分析，通常首先采用酶水解、酸解或碱解的方法，使大分子轭合物发生离解，继之用薄层析法等方法使离解后的各组分彼此分离，然后再用薄层显色、放射性自显影等方法，对各组分进行鉴定。

农药分配系数 partition coefficient of pesticide 一定温度和压力条件下农药分子在正辛醇和水两相体系中达

到平衡分配时，在正辛醇和水两相中的浓度之比，用 K_{ow} 表示。农药分配系数可影响农药加工、应用及农药进入环境后的再分配过程。K_{ow} 与农药在水中溶解性、土壤吸附系数、生物富集系数、农药毒性等环境行为参数有密切关系。测定 K_{ow} 的方法有摇瓶法、薄层色谱法、高效液相色谱法等。

农药分析 pesticide analysis 对农药原药和制剂中的有效成分、中间体和杂质含量进行的检测，简称农药分析。农药常量分析是指药品中农药有效成分含量较高，通常至少有百分之几。为了获得样品中农药的准确含量，分析方法的准确度与精密度应达到应有的要求。

农药公害 pesticide pollution; pesticide hazard 农药对环境所造成的危害。包括对人体的毒害、作物的污染、鱼和鸟类的毒害、生态系的影响等。主要是一些有机氯农药和含铅、砷、汞等重金属制剂，以及某些特异性除草剂等引起。有些有机磷农药，如对硫磷、内吸磷、甲拌磷等，对人畜具有剧毒，如果使用不慎，会引起急性中毒。防治措施有生产高效低毒农药、禁止和限制使用有害农药、加强农药管理工作、提高农药使用效果以及采用综合防治方法等。

农药规格 *pesticide specification* 农药产品达到预期防治效果所需要的质量指标与生产企业能够达到的质量指标的合理规定。其内容包括产品的理化性状、有效成分、主要杂质、检验方法、检验规则、包装储运要求等方面的质量指标。经过标准行政管理部门批准并发布实施后，可作为法定质量监督检验机构对市场上流通的农药产品进行抽查检验的依据，也常作为生产企业与用户之间购销合同的组成部分。

农药标准包括某些项目统一的标准检验方法，即方法标准和规范农药标准内容和表述方式的标准规范。国际标准有适用于农用药剂的 FAO 标准和运用于公共卫生杀虫剂的 WHO 标准。WHO 标准本身包括检验方法，FAO 标准中不提供检验方法，它直接采用国际农药分析协作委员会（CIPAC）方法。中国的农药标准分为三级，即国家标准、行业标准和企业标准。国家标准由全国农药标准化技术委员会审查通过，由原国家技术监督局批准并发布实施。行业标准由全国农药标准化技术委员会审查通过，由原国家石化局批准并发布实施，国家标准和行业标准为全国强制性实施标准。企业标准由企业制定，经地方技术监督行政部门批准并发布实施。低一级标准的技术指标不得低于高一级标准的技术指标。

农药化学 pesticide chemistry 农药化学是一门以化学、生物学、化学工业和农学等的理论和技术为基础的交叉学科。它包括农药的合成、剂型、加工及使用技术，农药分析和残留、生物测定及药效试验，农药毒性和毒理及农药环境毒理等。

农药环境标准 environmental

standard of pesticide 国家为保护人类健康及其生存环境，对环境中农药在一定时间和空间范围内容许含量做出的规定。按环境介质可分为大气环境质量农药标准、水环境质量农药标准和土壤环境质量农药标准。它们是评价环境质量和环境监督管理工作的法定依据，是保护环境和保障人类健康的重要手段。

农药环境监测 environmental monitoring of pesticide 连续或间断地测定环境中农药及其代谢物的浓度，观察并分析其变化及对环境影响的过程。由于污染源的强度、地理条件、气象条件不同以及农药污染物的分散性、扩散性和化学活性的差异等因素，污染的范围、程度及其影响也不同。因此要在一定范围内设立若干监测点，组成监测网络以监测农药污染物浓度变化及其影响，并据此制订适当减污措施和防治对策。环境监测的对象包括大气、水和土壤等，按监测目的不同环境监测可分为研究性监测、监视性监测和事故性监测等。

农药挥发作用 volatilization of pesticide 农药以分子扩散形式逸入大气的现象。农药的挥发作用可产生在农药的生产、储藏、使用以及施用后的各阶段之中。评价农药挥发作用必须考虑农药分子本身的挥发速度、农药从水中的挥发能力及其在土壤中的挥发速度。农药挥发速率与农药的蒸气压、水溶性、分子量、土壤吸附性能及土壤含水量等因子有关。

农药结合残留 bound residue of pesticide 用不改变分析目标化合物化学性质的常规方法不能萃取出的土壤和动植物中的残留农药。它是由农药母体化合物或其代谢物与土壤中腐殖质、植物体内木质素、纤维素等通过化学键合或物理结合作用，牢固地结合在一起形成的，伴随着农药降解过程同时发生的。由于用常规方法无法萃取，结合残留的测定一般采用放射性示踪技术进行测定。用^{14}C标记过的农药处理样品，再用农药残留分析中常规方法萃取，萃取后的样品残渣，用氧化燃烧使结合态农药中所含的^{14}C转化为$^{14}CO_2$，用碱性吸收液捕集，再用液体闪烁计数器测量其放射性活度。

农药淋溶作用 leaching of pesticide in soil 农药在土壤中随水垂直向下移动的现象。随着农药的向下移动，扩大了农药在土层中的分布范围，这一现象对农药的药效、药害及其降解作用均有影响。对于一些内吸性杀虫剂、杀菌剂，农药从地表通过淋溶作用进入土层后，增加了农药与根系接触的机会，有利于药效的发挥；而对于一些除草剂，则可能起到相反的作用，水溶性强的农药品种，可随水渗漏到土壤深层，从而可能导致对地下水的污染。农药进入土壤深层后，生物降解、化学降解、物理降解的条件都随之减弱，因此将会延长其在土壤中残留期。农药在土壤中的淋溶作用受农药性质、土壤特性和气候条件等因素影响。测定淋溶作用的方法有土壤薄层层析法、土柱淋洗法、渗水计

法和田间淋溶测定法等。由于农药的淋溶性能与土壤的吸附作用密切相关，有时也可用农药的吸附性能来估算农药的淋溶作用。

农药飘移 drift of pesticide 离开喷头的农药雾滴或粉粒被水平气流吹送到施药靶区以外的移动现象。漂移现象的产生是多种因子的综合结果，漂移距离（D）取决于喷头离地面的高度（H）、风速（u）和雾滴的降落速度（v）。其关系式为

$$D = H \cdot \frac{u}{v}$$

防止或者减轻农药漂移主要措施有：（1）控制农药雾滴直径；（2）在药液中添加水分蒸发抑制剂；（3）选择风速、相对湿度和温度适宜的天气施药；（4）根据需要控制喷头的高度。

农药全分析 full identification of pesticide 对农药原药的组成进行定性和定量分析的总称。它为农药登记提供产品有效成分含量、显著性杂质（一般规定为 >0.1%）的结构及其含量、水分、灼烧残渣、水和有机溶剂不溶物等数据。一般所有鉴定成分的质量百分数总和应超过98%，无法鉴别的杂质应描述研究过程并提供可能的推断结果。

农药确证 pesticide identification 对田间或实验室分析样本中未知农药或代谢物的化学特征做出准确的鉴定。一般需采用两种以上方法来证实某化合物的存在。定性确证是利用检测对象的理化性质、波谱学特征、色谱图中的相对保留时间、色谱-质谱联机谱图、薄层层析法中的相对比移值、化学反应性等来进行对比。定量确证是在定性确证基础上至少采用一种补充方法来证实检测结果的正确性和可靠性，如监测农药质量指标和检查标准执行情况时需进行定量确证。

农药污染 pollution by pesticides 因施用农药对环境特别是生物产生的污染。施药后，一部分附着在作物体上，或渗入植物体内残留，使粮、菜、水果受到污染；另一部分落在土壤上，有时则直接施在土壤中。所施农药除了部分被作物吸收外，还有部分或是通过蒸发和飘散，污染空气，或是随雨水及农田排水流入河湖，造成水体污染和鱼贝类污染。农产品内的残留农药又通过饲料污染畜禽产品。农药通过水、气、食品最终进入人体，引起各种急性危害和慢性危害。农药进入生态系统的物质循环后，可经食物链，浓缩放大，可杀死天敌和使昆虫产生抗性，有时还会使生态平衡遭到破坏。易造成环境污染的农药主要是一些性质稳定、在环境或生物体内不易分解消失，又具有一定急性、慢性毒害的品种。农药污染的防治主要是提倡病虫草害的综合防治，减少化学农药的用量。对化学农药，要研究筛选高效、低毒、低残留和高选择性（即非广谱的）的新农药，研究新的剂型和改进施用方法，严格遵守化学农药的安全施用标准等。配合以生物防治，培育抗病虫害的新作物品种，利用一些栽培技术，

做好植物检疫、病虫害的预测预报针对昆虫在生理上最薄弱环节施药和用其他物理方法（例如机械捕杀和利用黑光灯）等，可以减轻农药污染。

农药药害试验 phyto-toxicity test of pesticide 在温室或田间测定农药对生物体引起伤害作用大小的试验方法。在农药开发阶段药害试验是衡量药剂对作物安全性的基础试验之一。按发生药害时期可分为：（1）直接药害，即施用农药对当季作物造成的危害；（2）间接药害，即施用农药使邻近敏感作物受害。按照症状性质可分为：（1）可见药害，即可从形态直接观察到症状；（2）隐患性药害，从作物外观看生育无明显症状，但最终产量、品质受影响。产生药害的程度主要与农药质量、使用技术、作物和环境条件等多方面因素有关。为确定药害，根据不同具体情况需进行：（1）品种敏感性试验；（2）选择性试验；（3）种子处理中的特殊药害试验；（4）后茬作物影响试验；（5）特殊田间小区试验。

农药药效 effectiveness of pesticide 衡量农药药效大小的主要指标，是药剂在各种环境因素下对有害生物综合作用的效果。农药药效的表示一般根据防治对象、作物种类调查防治前后有害生物种群数量变化、危害程度、作物长势及产量等评价药效大小。杀虫剂药效主要有种群减退率、防治效果、被害率、保苗效果等；杀菌剂药效常用发病率、病情指数、防治效果；除草剂常用杂草覆盖度、地上鲜重或若干重减少百分率、防除效果、选择性指数、选择程度以及产量来表示。

农药移动作用 movement of pesticides in soil 土壤中农药以分子形态或吸附在固定微粒表面随水气的扩散流动，从一处向另一处转移的现象。影响农药移动作用的强弱与农药性质和环境因素有关，它与农药溶解性、蒸气压、分子结构特征、土壤吸附作用以及施药方法等密切相关。其测定法有田间实测法和室内模拟测定法。

浓差电池 concentration cell 两个相同电极在同一组分不同浓度的介质中组成的电池。

浓差腐蚀电池 concentration corrosion cell 由电极表面附近腐蚀剂的浓度差引起的电位差而形成的腐蚀电池。

浓差过电位 concentration overpotential 由浓差极化产生的过电位。

浓差极化 concentration polarization 电流通过时，由于电子交换反应，电极表面附近溶液层的反应物浓度低于无电流通过时的浓度（本体浓度），引起电极电势偏离无电流通过时的平衡电势。其偏离值在一定条件下由浓差大小决定。搅拌溶液或转动电极，可减小浓差极化，由于电极表面扩散层的存在，不能全部消除。

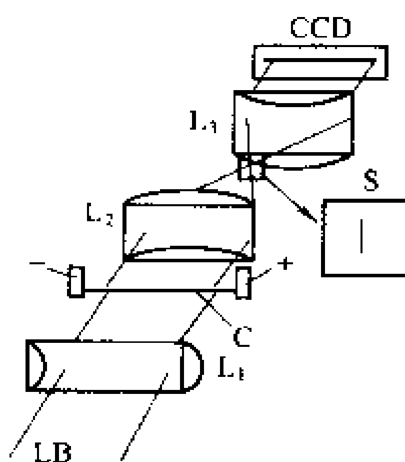
浓度淬灭 concentration quenching 纯的气态或液态的荧光物质在高于一定浓度时其荧光强度或荧光量子产率降低的现象。其原因有激发态分子与基态分子碰撞引起的动态猝灭、基态

分子会合引起的静态猝灭等。而假花青染料的水溶液只有在高浓度时发荧光，这种现象称为负浓度猝灭。负浓度猝灭的原因可能是浓度高时多个分子彼此会合形成了高分子的缘故。

浓度灵敏度 concentration sensitivity 指试样中被分析元素的含量改变与测定所得相应的信号的改变的比值。方法的浓度灵敏度若高，则工作曲线有较高的斜率。

浓度梯度成像检测器 concentration gradient imaging detector 激光探测束先被扩束至 70mm 的束斑，用一光阑取其中心光强均匀部分，通过柱面透镜 L_1 聚焦到分离毛细管中，透过毛细管的光束被与 L_1 垂直放置的柱面透镜 L_2 聚焦在光束挡板 S 上。挡板是一块中央有一条黑线的照相正片。当毛细管探测区域无样品区带时，全部光束被 L_2 聚焦在挡板黑线上，挡住探测光束，CCD 检测器成为暗场。一旦探测区域出现样品区带，折射率发生变化，探测束发生偏转。偏转光束偏离原来焦点位置，到达透镜 L_3 而被投射到 CCD 上被检测（如右图所示）。这种成像构型得到的电泳图谱简单，一个区带只产生一个正峰。

浓度型检测器 concentration detector 响应值（检测信号）大小与被测样品（溶质）的浓度相关的检测器。通常，在一定浓度范围（线性范围）内，响应值正比于溶质在流动相中的浓度。当进样量一定时，瞬间响应值（峰高）与流动相流速无关，而积分响应值（峰面积）与流动相流速成反比，峰面积与流动相流速的乘积为一常数。绝大部分检测器都是浓度型检测器，如紫外-可见光检测器、电导检测器、荧光检测器等等。

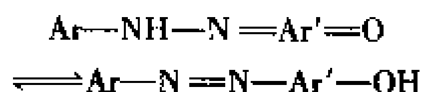


浓度梯度成像光路示意图
LB—激光束；L_1～L_3—柱面透镜；
C—毛细管；S—光束挡板；
CCD—电荷耦合器件

O

欧沃豪斯效应 Overhauser effect 欧沃豪斯首先于1953年在电子-核双共振实验中所发现的现象。当用一个高频场作用到试样上使电子发生共振并达到饱和,与之相应的电子能级上的布居数达到相等,从而破坏了与其相关的核自旋能级上的布居的平衡分布,并将通过热弛豫建立新的平衡,这时核自旋有关能级上的布居数差增加了很多,核极化增强$\frac{\gamma_e}{\gamma_N}$(电子与核的磁旋比之比)倍,核磁共振谱线可能增加几百倍,这种现象为Overhauser效应。

偶氮染料 azo dye 含有偶氮生色团染料的总称。偶氮染料的种类非常多,是占合成染料大多数的一类重要染料。有酸性染料、酸性媒染染料、直接染料、含金属染料、碱性染料、醋酸纤维染料、萘酚染料等。含有一个偶氮基的称为单偶氮染料,含两个偶氮基的称为双偶氮染料,含三个偶氮基的称为三偶氮染料,含三个以上偶氮基的称为多偶氮染料。偶氮染料通过芳伯胺基的偶氮化,然后与芳香胺或酚偶联合成。有些偶氮染料还属于偶氮橙 II、刚果红、吡唑啉酮染料、苯乙烯染料等。偶氮染料有如下互变异构体存在。



Ar—NH—N ═Ar′═O

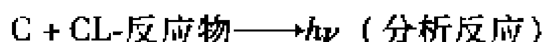
⇌Ar—N ═N—Ar′—OH

偶氮基本身还有顺反异构体,一般反式结构稳定。

偶合反应化学发光 coupling reaction chemiluminescence 一个发光反应与另一个化学反应偶合而产生的化学发光称为偶合反应化学发光。其过程可用下列反应式表示。



A + B ⟶C (偶合反应)



C + CL-反应物⟶$h\nu$(分析反应)

只要待测物质在偶合反应中能消耗反应所需要的反应物,或能生成产物,就可以用这种方法进行测定。例如,目前常利用偶合反应中生成过氧化氢,后者再与某些化学发光试剂反应产生化学发光,然后对所产生的化学发光进行测定。

偶极矩 dipole moment 偶极矩是表示分子中电荷分布情况的物理量,极性分子极性的大小由偶极矩来衡量。偶极矩的大小等于正负电重心间距离与电荷量的乘积。一般可由分子的对称性推测分子有无偶极矩,也可据此判断该发子振动是否红外活性,得到分子结构的信息。

偶极力 dipole interaction force 一种分子间的物理相互作用力。偶极矩分别为μ_i,μ_j的两个分子间平均偶极相互作用势能U_{ij}为

$$U_{ij} = -\frac{2}{3kT(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{\mu_i^2\mu_j^2}{r^6}$$

式中,k为波耳兹曼常数;T为热力学温度;ε_0为介电常数;r为两个分子中心之间的距离。偶极作用势能还与分子间相互取向有关。$T = 300K$时,季铵盐分子$\mu = 33 \times 10^{-30}$ cm,

当$r = 1nm$，偶极方向为反平行时，偶极作用势能最大，为50kJ·mol^{-1}。而平均值则为9.7kJ·mol^{-1}。

偶极跃迁矩 dipole transition moment 分子的偶极子与红外光的电矢相互作用引起电偶极的变化，变化了的电偶极是具有大小和方向的矢量，称为偶极跃迁矩。红外吸收谱带的强度与偶极跃迁矩的平方成正比。当分子具有对称中心时，如$CH_2=CH_2$的$\nu_{c=c}$，偶极跃迁矩为零，无红外活性，其红外吸收强度为零。

偶然误差 accidental error 是早期化学文献中对随机误差的一种称谓。在数理统计文献中使用“随机误差”一词，不使用“偶然误差”一词。因为“偶然误差”一词容易给人以误会，以为偶然误差是偶然产生的误差，其实不然，“偶然误差”（即随机误差）是不可避免的，只是各种大小误差出现的概率不同罢了。参见随机误差条。

耦合常数 coupling constant 表征两磁性核的自旋通过成键电子传递的间接相互作用大小的物理量。A、B两核相隔n个化学键的耦合常数，记以$^nJ_{AB}$，单位为Hz。由于这种作用是标量耦合，因此取决于分子结构，却与分子取向无关，也与外加静磁场的大小以及其他外界条件无关。J有正负之分，需用专门测量技术和处理方法来确定，常规谱图只能获得其绝对值。利用耦合常数的大小可用以判断化合物内部原子、基团之间的连接顺序、空间位置等。^{1}H-NMR谱中常见的是$^3J_{HH}$，在饱和烃中，约为6～8Hz。烯烃中处顺式位置^{1}H间的J约为7～11Hz与反式为12～20Hz，常是判断顺反异构体的重要依据。

耦合频率 coupling frequency 键的振动方式和吸收谱带出现的数目之间并非总是一一的对应关系。在分子中具有相同对称性的两个键紧密相邻时，且各自的谱带都很强，并在同一个区域中吸收，则会产生耦合现象。振动的耦合会引起吸收谱带偏离特征频率的位置，一个向高频方向，另一个向低频方向移动。

P

爬行模型 crawl model 描述带电大分子通过高聚物网络迁移行为的一种理论模型。在电场的作用下，溶质拉伸，电场愈强，溶质被拉伸得愈长。假设溶质像线性链条，它不能进入高聚物网络中，但可以像蛇一样在其间穿行，也称爬行。

帕特逊法 Patterson method 晶体结构测定中破解相角问题的一种方法，又叫向量空间法。实测的衍射强度与结构振幅的平方成正比，用结构振幅的平方作为傅里叶级数的系数，计算所得的级数被称为帕特逊函数。以帕特逊函数为基础推导初始结构模型的方法，就称为帕特逊法。如重原子法、分子置换法等。

帕特逊函数 Patterson function 用结构振幅的平方作为傅里叶级数的系数，计算所得的傅里叶级数被称为帕特逊函数，用 $P(UVW)$ 表示。在 $P(UVW)$ 中，点 U、V、W 处的数值代表整个晶胞三个轴向坐标相差 U、V、W 的两点间的电子密度乘积加和的平均值，所以 U、V、W 表示的是向量空间。帕特逊峰的位置对应于晶胞中原子间向量，一对原子不论在晶胞中处于什么位置，只要二者的坐标差相同，在向量空间中，帕特逊峰的位置就一样。帕特逊峰的高度则与形成该向量的两个原子的核外电子数的乘积成正比。由于任意两个原子之间都有正向向量和相应的反向向量，所以帕特逊函数是中心对称函数。

帕特逊合成 Patterson synthesis 在结晶学研究中，以结构振幅平方为系数的傅里叶级数运算过程。计算而得的傅里叶级数称为帕特逊函数，是解决相角问题的重要工具，通过对帕特逊函数的分析和处理，可以推导出供进一步修正用的初始结构模型。

拍 beating 设有两列频率相同、振动方向相同、位相差相同或恒定的波，它们经叠加会产生干涉。假设这两列波的振幅也相等，则在空间某点产生的合振动为各自振动之和，该合振动的振幅为时间的函数，在任一给定的点，各合成的振幅不是恒量，而是随时间而变化。对于声波而言，这种变化着的振幅会使响度发生变化，这种现象就称为拍。

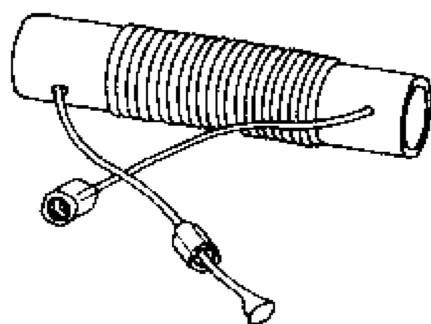
排斥极限分子量 exclusion limit molecular weight 对特定的凝胶色谱柱而言，在该柱上完全被固定相排斥，在柱上无保留的溶质的最小分子量。即超过此分子量的溶质，因都不能进入填料表面的孔隙，都在死体积（排斥体积）处流出，相互之间无法分离。

排斥体积 exclusion volume 在离子排斥色谱中，因受 Donnan 膜排斥作用不能进入固定相的强电解质离

子，不被固定相保留，它从进样口被流动相带至检测器流动池所对应的流动相体积。

排阻薄层色谱法 exclusion TLC 采用葡聚糖凝胶制成薄层，当展开剂流过薄层时，混合组分按分子大小不同，在葡聚糖凝胶薄层上反复进行扩散和排阻，从而使混合组分达到分离。

盘管式反应器 turn coil reactor 是 FIA 流路中的重要部件。又称混合圈或反应圈，试样和试剂在这里发生混合和反应。是用一定长度的聚四氟乙烯管、按螺旋方式盘绕在筒状骨架上的（筒径约为 1～2cm），故称盘管。如下图。筒径、管径和管长均影响混合效率。据报道，采用双筒骨架按 8 字形绕制的盘管，具有更好的混合和反应效率。



判别分析 discrimination analysis 在事先已知类别特征的情况下，建立判别模型对被研究对象进行类别归属的过程。如有 m 个总体，其分布函数分别为 $F(x_1), F(x_2), \cdots, F(x_m)$，对于一个新的样品，要判别它是属于哪一个总体。它在化学、生物医学等各方面都有广泛的应用。如一个病人肺部有阴影，可能是肺结核、良性肿瘤或肺癌，医生对照病人肺部阴影特点及肺结核、良性肿瘤或肺癌所形成阴影的特征，判定病人患的究竟是肺结核、良性肿瘤或肺癌。

泡沫浮选法 foam floatation 使用适当的起泡剂（如表面活性剂），使待测组分以离子形式或络合物形式随泡沫一起与原试样溶液分离而实现分离或富集的一种分离方法。到目前为止，已对近 30 个元素的泡沫浮选法分离作了广泛的研究。例如，以油酸钠（表面活性剂）和氮气鼓泡的浮选方法，可用于氢氧化铝沉淀胶体的浮选。该法对 $1ng \cdot g^{-1}$ 的 Cr（Ⅲ）等五种金属离子的回收率均在 95% 以上。

泡形池 bubble form pool 将毛细管检测窗口部分加热吹制成球泡状，提高检测光程，从而提高毛细管柱上检测的灵敏度。

配（位）合物 coordination compound 简称配合物，亦常称为络合物。由中心体（如金属离子）与数目不等的配体结合而形成。配合物可以是中性分子，亦可是配阳离子，如 $Co(NH_3)_6^{2+}$ 等，或配阴离子，如 $Fe(CN)_6^{3-}$ 等。配合物类型繁多，根据构成配合物中心体的价态，配体的给电子特性和结构，可分为经典配合物、π 酸配合物、有机金属配合物和簇状配合物。分析化学中应用最广泛的是经典配合物，即具有空价电子轨道的原子或离子（中心体）与具有非键电子对的配体通过配位键形成的

一类配位物。

配合物形成常数 formation constant of coordination compound 亦称配合物的稳定常数（stability constant）。配位反应的平衡常数。例如，当金属离子 M 与配体 L 形成 ML_n 型配合物时，其总反应式（略去电荷）为 $M + nL \rightleftharpoons ML_n$，其形成常数

$$K_{MLn} = \frac{[ML_n]}{[M][L]^n}$$

式中，$[ML_n]$、[M] 和 [L] 分别为反应达平衡时配合物 ML_n、游离金属离子 M 和游离配体 L 的摩尔浓度。K_{MLn}值愈大，表示所形成的配合物愈稳定。由于配合物 ML_n 是逐级形成的，为与各级的形成常数区分，K_{MLn} 又常以 $K_{总稳}$或 $K_{稳}$ 表示。

配位滴定 complexometry 常称为络合滴定。利用溶液中形成配合物的反应来进行定量滴定的方法。由于金属离子与多配位体如 EDTA 类氨羧络合剂等形成的配合物称为螯合物，利用生成螯合物的滴定则称为螯合滴定（chelatometry）。由于可以采用直接滴定、返滴定、置换滴定和间接滴定等方式，配位滴定可以直接或间接地测定周期表中大多数元素及其化合物。

配位体交换色谱 ligand exchange chromatography 以离子交换基团上结合了金属离子的离子交换树脂作固定相，利用预先结合在固定相金属离子周围的配位体和流动相中的被测配位体之间的交换反应，进行配位体分离分析的色谱方法。

膨松剂 bulking agents 在以小麦粉为主的焙烤食品中的添加剂，它在加工过程中受热分解，产生气体，使面胚起发，形成致密多孔组织，从而使制品膨松、柔软或酥脆的一类物质。它可分为碱性膨松剂和复合膨松剂两类，前者主要是碳酸氢钠和碳酸氢铵等；后者则通常由三种组分构成，即碳酸盐、酸性物质和淀粉等物质，其中碳酸盐及酸性物质产生二氧化碳，淀粉则有利于膨松剂保存，调节气体产生速度，使全体均匀分布。

膨胀床色谱技术 expanding bed chromatography 一种逆向进样的色谱技术。样品从柱底进样，将填料吹起，未被填料保留的物质从柱顶流出。洗涤后，再改变洗脱液并反转流向，从柱顶开始洗脱。此法的优点是样品不必预处理即可进样，甚至可以允许不溶性颗粒进入柱子。膨胀床色谱技术多用于性质相差较大的蛋白质之间的分离，如发酵液提纯等。这时目的蛋白质多结合于柱底部的填料上，反转流向洗脱时，可呈一尖峰状被洗脱，减少涨缩步骤。

碰撞变宽 collision broadening 又称为压力变宽。处于热运动中的原子，彼此之间发生碰撞或与分析体系内其他粒子发生非弹性碰撞，在碰撞的瞬间使辐射过程中断，导致激发态原子寿命缩短，引起谱线变宽。碰撞变宽包括洛伦兹变宽和霍尔兹马克变宽。碰撞宽度 $\Delta\nu_c$ 与碰撞寿命 τ_c 成反比。

$$\Delta\nu_c = \frac{1}{2\pi\tau_c}$$

由于 $\tau_c \ll \tau_N$，所以，谱线的碰撞宽度 $\Delta\nu_c$ 远大于谱线的自然宽度 $\Delta\nu_N$。在低气压下，$\Delta\nu_c$ 与气压成正比，且随气体种类不同而不同。碰撞变宽谱线的线型函数是洛伦兹型函数。碰撞引起变宽，也使碰撞前后的辐射相位发生变化。

碰撞猝灭 collisional quenching 又称动态猝灭。是荧光猝灭的一种。激发态荧光分子与猝灭剂碰撞，使荧光分子失去能量回到基态。动态猝灭符合 Stern-Volmer 方程，猝灭的温度系数为正值，荧光分子的吸收光谱无变化，荧光强度显著降低甚至不发荧光。

碰撞活化解吸 collisionally activiated dissociation; CAD 也称碰撞诱导解离（collision induced dissociation; CID）。是质谱分析中用来研究化合物组成的一种技术。用惰性气体分子在质谱仪的碰撞区与被分析物离子碰撞，在一定的碰撞气体的压力下，反应离子的部分动能转变成内能。由于离子内能增加，导致原来的被分析物离子发生诱导分解，产生碎片离子。

碰撞能量转移 collisional energy transfer 由分子碰撞所引起的能量转移现象，包括辐射能量转移、交换能量转移等。辐射能量转移指作为供体的荧光分子所发射的荧光为能量受体分子所吸收，导致受体分子被激发。能量转移的效率取决于供体的发射光谱与受体的吸收光谱的重叠程度，重叠度越高，能量转移的效率越高。如果溶液中受体的浓度足够大，可能引起供体的荧光光谱发生畸变和造成荧光强度测定的误差。交换能量转移在供体和受体两者的电子云相互重叠时突出，激发态供体分子的光电子可能改变位置成为原先基态受体分子的电子结构的一部分，而供体分子又从基态受体分子那里交换取得一个电子返回基态。当供体的平衡激发态能量比受体的 Frank-Condon 激发态略高时，交换能量转移很有效。

碰撞气 target gas 在碰撞活化解离（CID）实验中，在碰撞室里与被分析离子进行碰撞的气体，一般常用惰性气体有 He、Ne、Ar、Kr、Xe，以及 O_2、N_2 或 CH_4 气体等。

皮尔松符号 Pearson symbol 由 W. B. Pearson 提出的描述晶体结构的符号。这种晶体结构符号从左到右共有三个位置，依次是晶胞形式，布拉维格子和每个晶胞中所含原子的数目。用小写字母 a、m、o、t、h、c 分别代表三斜、单斜、正交、四方、六方和立方晶胞，用大写字母 P、A、B、C、F、R 和 I 分别代表简单、A-、B-、C-底心、面心、R 心和体心格子。例如氯化钠、氯化铯的晶体结构可以分别表示为 cF8、cP2 等。这种符号被衍射数据国际中心所采用。

偏差 deviation 又称离差。是单次测量值与测量平均值之差，反映了测量的精密度。分绝对偏差和相对偏差

$$（绝对）偏差 = 单次测量值 - 平均值$$

$$相对偏差 = \frac{偏差}{平均值}$$

偏差平方和加和性 additivity of sum of deviation square 总偏差平方和等于试验误差与各因素所产生的偏差平方和之总和。如果一个测定结果受多个因素的影响，每个因素及实验误差都要对测定的总偏差做出相应的贡献。当用偏差平方和来表征测定结果的偏差大小时，则总偏差平方和等于试验误差与各因素所产生的偏差平方和之总和。它是进行方差分析的基础。在分析测试中，用来考察与评价因素效应。

偏度 skewness 表征概率分布密度曲线相对于平均值不对称程度的特征参数，以 c_s 表示。

$$c_s = \frac{\sqrt{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^3}{[\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2]^{\frac{3}{2}}}$$

式中，x_i 为测量值；$\bar{x}$ 为测量值的算术平均值；n 为测量值的数目。正态分布的偏度为 0。$c_s<0$ 称分布具有负偏离，表示小于平均值的测量值分布离散较大；$c_s>0$ 称分布具有正偏离，表示大于平均值的测量值分布离散较大。可用偏度来检验测量值的分布是否偏离正态分布。

偏共振去耦 Off-resonance decoupling ^{1}H 完全去耦时，辐照场 $\boldsymbol{B}_2$ 的频率 ν_2 是对准^{1}H 的中心位置。偏共振去耦是将辐照场率 ν_2 移至^{1}H 谱共振范围之外，施加较大的功率对体系进行辐照，此时与^{1}H 耦合的核比如^{13}C之间的耦合常数会有不同程度的缩小，因而减小了^{13}C 多重线的裂距，调整 ν_2 偏离中心位置的距离和 $\boldsymbol{B}_2$ 的功率，可避免谱线的重叠又保留了自旋耦合信息，而利于谱线的归属，这就是偏共振去耦，也称为不完全去耦。参见**宽带去耦**条。

偏回归系数 partial regression coefficient 在多元回归分析中，随机变量（响应值）对各个自变量（影响因素）的回归系数，表示各自变量（影响因素）对随机变量（响应值）的影响程度。

偏极化因子 polarization factor 在晶体结构测定中，将实测的衍射强度数据还原为结构振幅时需要使用的一种校正因子。用于校正在数据收集过程中，X 射线的偏振状态对衍射强度的影响。X 射线被电子散射时，散射波的振幅正比于入射线电矢量与散射线传播方向间夹角的正弦值。如果入射 X 射线是非偏振的，经电子散射后，散射线为部分偏振的，散射强度与布拉格衍射角 θ 有关，此时的偏极化因子 $p=\frac{1}{2}(1+\cos^2 2\theta)$。在$\theta=0°$ 或 90° 时，$p=1$，散射线是非偏振的，$\theta=45°$时，偏振程度最高，引起强度的下降也最大。如果入射 X 射线是部分偏振的，例如是由晶体单色器“反射”的单色光，则偏振因子的具体形式与实验装置的几何配置有关。

偏态分布 skew distribution 测量值分布的一种形式，其偏度不为零。在分析测试中，当测量对象的量值分布范围很宽时，测量值有时呈现偏态

分布。测量值分布是否偏离正态分布，可用偏度进行检验。正态分布的偏度为0。若由测量值计算的偏度的绝对值大于约定显著性水平 α 的偏度临界值，表示测量值分布偏离正态分布。

偏相关系数 partial correlation coefficient 在多元回归分析中，在消除其他因素影响的条件下，所计算的某两变量之间的相关系数，表示两变量之间的相关的程度。

偏倚 bias 实际测量值与被测量真值之差。偏倚分固定偏倚和相对偏倚。固定偏倚使每个测定量值都增加或减少某一个同样的量，相对偏倚使每个测量值都沿着相同的方向改变一个固定的百分比。偏倚是由系统误差产生的，影响测量结果的准确度，多次重复测量不能消除偏倚。

偏振光 polarized light 分为圆偏振光和椭圆偏振光。一束光线的电场矢量在沿着传播方向的单一平面内振动，称为平面偏振。如果各个电场矢量能分解为两个互相垂直、具有相同振幅、相位差为1/4波长的成分，这束光可称为"圆偏振光"。如果电场矢量分解为两个互相垂直、具有不同振幅、相位不为1，1/4，1/2，3/4，1等波长的成分，这束光即为"椭圆偏振光"。

偏振红外光技术 polarization infrared technique 偏振光通过分子有序排列的结晶样品时，各特征峰的吸收强度将与普通红外光谱不同。若化学键振动的偶极与偏振光在同一平面内，吸收加强；若偶极与偏振光面成直角，则无吸收。因此将样品转动90°后，某些强吸收峰就会变成弱吸收峰。为此偏振红外光技术可以用来测定样品的红外二向色性、研究分子的排列定向；单晶的结构、分子链的构象和取向；研究橡胶、纤维和塑料等高聚物的精细结构；官能团在晶体、聚合物和吸收层中的取向等方面的信息。

偏振棱镜 polarizing prism 光的偏振可提供光与物质相互作用信息，因而成为应用广泛的分析检测手段。为了获取偏振光或检测偏振信息，常用由各种双折射晶体材料制成的偏振棱镜。偏振棱镜可以使自然光变成偏振光，也可成对使用检测物质的偏振信息，从而获得物质成分、结构信息。常用的偏振棱镜可分为两类：能同时给出两束偏振面互相垂直（o光和e光）的线偏振光（如渥拉斯顿棱镜、洛匈棱镜），只能给出一束在某一固定面上振动的线偏振光的棱镜（如尼科尔棱镜）。由于近代人工偏振器件制造技术的发展，大多数应用场合都已采用人工偏振片取代尺寸小而昂贵的偏振棱镜。

偏振片 polaroid 是用人工方法制成的二向色性多晶薄膜，可用作起偏元件或检偏器，代替昂贵、小尺寸的天然晶体偏振棱镜。例如碘代硫酸奎宁有强烈的二向色性，把它淀积在塑料薄膜中，经过拉伸使这种二向色性多晶物沿拉伸方向排列整齐，可在垂直薄膜方向表现出强烈的二向色

性——吸收 o 光而通过 e 光。将这种薄膜夹在透明的玻璃片或塑料片之间，就可制成人造偏振片，不但价廉而且理论上尺寸大小不受限制。

偏转线圈 deflexion coil 在电子显微镜等分析仪器装置中，经常需要使荷电粒子束（电子束和离子束）进行聚焦和扫描，一般通过一组线圈来实现。其作用是在线圈中通过电流产生磁场，使经过的荷电粒子发生偏转。

偏最小二乘分光光度法 partial least squares regression spectrophotometry 将化学计量学中的偏最小二乘法处理多组分复杂体系的吸光度数据的一种分析方法。与主成分回归法相同，它们都是建立在因子分析基础上的化学计量学方法。该法对校正组样品的吸光度矩阵和浓度矩阵同时进行主成分分解，然后在吸光度得分矩阵和浓度得分矩阵间建立回归关系，计算出回归系数矩阵，建立偏最小二乘回归模型，利用此模型便可完成对未知样品的浓度预报分析。偏最小二乘法能较好消除非线性加和和背景引起的干扰，一般均可获较好的结果。是国内外公认的一种较好的多组分同时测定的化学计量学方法。

漂白剂 bleaching agents 破坏、抑制食品的发色因素，使其褪色或使食品免于褐变的物质，分为氧化漂白及还原漂白两类。氧化漂白剂是通过其本身强烈的氧化作用使着色物质被氧化破坏，从而达到漂白目的，这类试剂使用很少。广泛使用的则是还原漂白剂，并且大多属于亚硫酸及其盐类化合物，它们通过产生的二氧化硫的还原作用使果蔬褪色。

漂移 drift 漂移是指基流朝某一定的方向缓慢变化的现象。通常是在色谱图上表现为基线朝一个方向变化，故也称基线漂移（baseline drift）。漂移的大小是用单位时间内基流变化的数值来表示。参见**基流**条。

漂移速率 drift rate 电镜稳定性的一个重要指标。在电子显微分析中，由于经常在很高的放大倍数下工作，对图像的稳定性要求很高。由于仪器本身的稳定性原因，样品的图像会随时间发生漂移。通过一定时间间隔拍摄同一电镜样品的像，通过测量特征点的距离就可以计算出仪器的漂移速率。在进行仪器漂移速率测定时，应该排除样品制备不好所引起的漂移现象。

飘尘 dust 颗粒物的一类。对颗粒物目前尚无统一的分类方法，按尘在重力作用下的沉降特性可分为飘尘和降尘。颗粒直径小于 10μm 的称为飘尘。飘尘相当大部分比细菌还小，人的肉眼看不见，可以在大气中漂浮数年甚至几十年，有的含有多种有害金属和致癌物质。飘尘从呼吸道进入人体，约有一半可附着在肺壁上，是构成或加重人类呼吸道疾病的重要原因。飘尘对环境的有害影响为：削弱日光的照射和能见度，使空中多云、多雾、浑浊，可能降低地表的温度，造成物品的肮脏甚至损坏。飘尘在居

住区大气中最高允许浓度一次为 $0.5mg \cdot m^{-3}$，日平均为 $0.15 mg \cdot m^{-3}$。

拼和溶剂技术 split solvent technique 基于不同溶剂各自的红外透明区，用多种溶剂分别溶解试样，分段测定，组成一张完整的无溶剂吸收谱带的样品的红外光谱图的技术。

贫燃火焰 fuel-lean flame 火焰中燃气的量比按化学计量所需要的量尚不足的火焰。这种火焰燃烧完全，但不很稳定，背景浅，易获得较高的信噪比。富含有 OH、O_2、O、NO 等氧化性物质，氧原子浓度较高，火焰具有较强的氧化性，不利于易形成单氧化物、难解离氧化物的元素的原子化，适用于氧化物稳定性差的元素（如金、银、铂、铑等）的测定。

频闪扫描电镜 strobe scanning electron microscope 为了能够在高空间分辨率条件下对电子器件进行动态观察而出现的一种可以用来分析集成电路中各点的电压波形，从而得到信号在各点的传输时间的扫描电镜。其基本原理如下：一束电子在高频偏转场的作用下，经过光阑小孔后得到宽度极窄的脉冲电子束。频闪扫描电镜对分析高速、高集成度半导体器件的性能和故障检查是十分有用的。

频数 absolute frequency 在一组依数值大小顺序排列的测量值中，当按一定的组距将其分组时出现在各组内测量值的数目。出现在各组内的测量值的数目与测量值的总数之比，称为相对频数，亦称频率。数值小于某个值的测量值出现的总数，称为累积频数。频数或相对频数随测量值的变化曲线，称为频数分布曲线和相对频数分布曲线。随着测量值数目增加到足够多，测量值分组分得极细，频数分布曲线变为平滑的曲线，此称为频率分布曲线。

频域信号与时域信号 frequency domain signal and time domain signal 为获得图谱，可用两种方式接收信号。在连续波方式 NMR 实验中单频率扫频所记录的是与时间无关的对应频率下共振信号强度的大小，是频域信号。在脉冲傅里叶方式的 NMR 实验中，通常使体系中所有不同共振频率的核同时被激发，接收这些共振的自由感应衰减信号（称为 FID），是随时间而按指数衰减的时域信号。只要对此信号进行傅里叶变换，其中的实数部分即可转换为呈吸收型谱线的频域信号，获得图谱。另一半是相位相差 180°的虚谱。

平板色谱 planar chromatography 指固定相呈平板状的液相色谱方法。包括以薄层板为固定相的薄层色谱和以色层纸为固定相的纸色谱。

平板双层磷脂膜 planar bilayer lipid membrane 简称 planar-BLM，又称黑膜（black membrane）。是由两性的磷脂分子形成的最简单的仿生双层膜体系。将磷脂的有机溶液涂刷到隔开两个水相的直径约 10 mm 的小孔上，经一段自发变薄过程后就会形成双层膜。

平衡排斥理论 equilibrium exclu-

sion theory 又称体积排斥理论，是凝胶色谱分离机理的一种理论模型。它认为溶质在分离过程中存在一个扩散平衡，因为溶质在流动相中的浓度大于在固定相孔隙内的浓度，因而溶质要从流动相中扩散或“渗透”到固定相孔隙内，并从孔隙中排出。该理论不考虑溶质在填料表面的吸附和其他作用力，认为渗透仅决定于分子体积大小。体积大于填料孔径的溶质分子不能渗透到孔内，很快（在排斥体积附近）流出色谱柱。体积比填料孔隙小很多的溶质分子可以自由进出所有孔隙，在固定相中停留时间最长。对于体积与填料孔隙相当的溶质分子，随分子体积增大，进出孔隙的自由度减小，因而保留减小。

平衡透析 equilibrium dialysis 用于研究半抗原与抗体之间初级反应的一种技术。用一个抗体不能透过、半抗原可以透过的玻璃纸透析膜将容器分成两部分，抗体位于一侧，半抗原位于另一侧。达到平衡状态时，半抗原透过滤膜，游离半抗原的数量在每侧相等，并且在抗体侧还有半抗原结合到抗体上。用一种放射活性标记的半抗原来测定结合半抗原对游离半抗原的比率，就可确定半抗原-抗体相互反应的内在相关常数。

平滑技术 smooth technique 降低谱图噪声的一种方法。用于平滑技术的数学方法很多，最常用的是萨维特斯基-戈莱（Savitzky Golay）法。此法是根据最小二乘法而采用的多项式近似法，可选择不同的平滑点数，又称平滑级数，平滑点数必须是奇数值。这种平滑方法是将峰尖与峰谷处的各数据点完全等同地进行处理，这种数据处理方法可能会使谱峰变形，使峰位发生位移。平滑处理时所取级数愈高，信噪比得到改善的程度愈大，但谱峰变形也愈严重，降低了光谱分辨率。

平均分子（质）量 average molecular weight 由元素的各种同位素质量及其所占比例计算得到的分子（质）量。在质谱分析中，对分子（质）量为1000u以上的样品，使用平均质量的情况较多，而对分子（质）量小于1000u的样品，则习惯使用整数质量（nominal mass）或者单一同位素质量（monoisotopic mass）。

平均流速 average rate of flow 在极谱学中汞（或其他液态金属）离开毛细管尖端时刻汞（或其他液态金属）滴的质量与滴下时间之比，它是汞滴的全部生命期间瞬时流速的平均值。

平均偏差 average deviation 又称算术平均差。是偏差绝对值的平均值，记为 AD

$$AD = \frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i - \bar{x}|}{n}$$

式中，$\bar{x}$ 是测量平均值。平均偏差不能正确地反映各次测量值之间彼此相符合的情况，现在已很少使用。

平均值 mean; average 算术平均值的简称。参见**算术平均值**条。

平均值控制图 $\bar{x}$-control chart 用在较长时期内积累的预备数据建立起来的以监控产品特性量值的平均值变化趋势的控制图。建立控制图的样本数 m 不得小于 25 个。控制图的纵坐标是产品特性量值的平均值，横坐标是抽样时间或样本序号，以各样本平均值 $\bar{x}_i$ 的平均值 $\bar{\bar{x}} = \sum \bar{x}_i / m$ 为中心控制线，当各个样本容量相同时，以 $UCL = \bar{\bar{x}} + A\bar{S}$ 与 $LCL = \bar{\bar{x}} - A\bar{S}$ 分别为上、下控制限，绘制平均值控制图，其中 $\bar{S}$ 是样本标准偏差的平均值、A 是与样本容量有关的系数，可由统计书和手册中查得。平均值控制图的优点是稳定性好。因为平均值是多个单次测定值的平均值、个别测定值的波动对其影响较小。用来监控产品特性量值的平均值变化趋势，预防不合格产品的出现。通常是将平均值控制图与标准偏差或极差控制图联合起来使用。

平面反射镜 plane mirror 工作面形为平面的反射镜，在光学系统中利用光的反射作用转折光的传播方向，达到导引光束或缩小光学系统外形尺寸的目的。反射镜上一般镀有提高反射率的金属膜层，在紫外-可见区常用银膜、铝膜，在红外区常用金膜或多层介质膜。在特殊场合（如傅里叶变换光谱仪中的干涉仪中），还使用由玻璃、光学晶体材料制成的半透射半反射平面镜，作为光束分束镜；有时，平面反射镜上镀有特殊膜层可控制其反射率达到所需的大小（如激光器谐振腔输出反射镜）；平面反射镜在符合布儒斯特角时，还可作为偏振元件。

平面光栅光谱仪 plane grating spectrograph 以平面光栅作为分光元件的摄谱仪。有透射式和反射式两类。由于制造精密的透射光栅比较困难，现代光栅光谱仪几乎都采用反射光栅。按照成像系统的不同，可分为艾波特装置（Ebert），捷尔尼-特尔纳（Czerny-Turner）型装置和立特罗型（Littrow）装置。

平面晶体单色器 plate crystal monochromater 利用平面晶体对 X 射线进行波长色散的光学器件。根据使用目的和光路设计的不同，可分为布拉格法、劳埃法、边晶法和双晶法四种。布拉格法是通过转动色散晶体或改变接收狭缝的位置来获得不同波长的单色 X 射线，是应用最广泛的一种方式。劳埃法是利用同一块晶体的不同晶面在不同方向上得到一组单色光，可制成结构紧凑、同时测量多种元素分析谱线的多道光谱仪。边晶法也是固定晶体，但利用的是晶体的边缘晶面，特点是结构简单、不需要可动部件、操作方便等。双晶法是利用两块晶体进行色散，可以改善波长分辨率和峰背比。

平面镜分析器 plane mirror analyzer; PMA 一种结构最简单的静电偏转型分析器。用两块平行板产生均匀的偏转电场，使电子束发生偏转，通过改变偏转电场的强度就可以使不同能量的电子从能量分析器中通过到

达检测器。传输率和能量分辨率较差，故很少使用。

平面色谱法 planar chromatography 平面色谱法包括纸色谱法、薄层色谱法及薄层电泳法。它的分离原理与柱色谱基本相同。其特点是固定相被涂布于平面载板（或纸）上，流动相借助毛细管作用流经固定相使样品分离并保留在固定相上，为开放式的离线操作。其设备简单，分离速度快，可同时平行分离多个样品，目前广泛应用于医药、食品、环境等领域。参见**纸色谱**条、**薄层色谱**条及**薄层电泳**条。

平面衍射光栅 plane diffraction grating 平面衍射光栅是由在同一平面上彼此平行、等宽、等距间隔排列缝状细微结构构成的光衍射元件。缝状结构可以是透光的（平面透射光栅）或反射光的（平面反射光栅）。在天文观测拍摄天体光谱时使用平面透射光栅，在光谱分析仪器中都用平面反射光栅。光束投射到平面衍射光栅后，光波阵面被缝状结构分割，造成单缝衍射和多缝干涉效应，使不同波长的入射光按波长顺序受到不同程度的衍射和干涉作用，最终以不同大小的衍射角出射，从而达到波长空间分离——光的色散目的。平面衍射光栅具有比光谱棱镜大得多的色散率，而且不需能透光的优质光学玻璃或光学晶体，因此已成为应用最广泛的色散元件。

平台石墨炉 platform furnace 一种用于实现等温原子化的带有石墨平台的管式石墨炉。平台通常长约5mm，宽约4mm，厚约1mm。放在马斯曼高温石墨炉内，试样由石墨管进样孔注入到平台上，依靠炽热石墨管内壁的辐射热加热石墨平台，使试样蒸发进入温度等于或高于平台温度且基本达到恒定的气相，并在此恒定温度条件下原子化。它是里沃夫（B. V. L'vov）首先提出的一种在石墨（管）炉内实现等温原子化的原子化器。

平台原子化 plateau atomization 一种实现等温原子化的重要方法，是里沃夫（B. V. L'vov）1978年提出的。在Massmann石墨炉内放置一只石墨平台，平台通常长约5mm，宽约4mm，厚约1mm。放在石墨管进样孔的正下方，试样由进样孔注入到平台上。石墨管作为电阻发热体，通电后发热升温，炽热的石墨管内壁辐射热加热石墨平台，使之受热升温。由于平台升温滞后于管壁升温，当平台达到被测元素化合物蒸发、分解温度和被测元素的原子化温度时，管内气相温度已高于该温度，并基本达到恒定，有效地消除了马斯曼高温管式石墨炉内存在的在时间上的不等温性，被测元素化合物在基本等温条件下由平台蒸发进入气相实现原子化。这样可以减少以至避免已分解的分子再重新复合和凝聚而产生的分子吸收与光散射的影响，有利于消除基体干扰。

平行测定 parallel determination 在相同的试验条件下，用同一方法对

同一试样进行的重复测定。

平行流动注射分析 parallel FIA 一种FIA体系，使两个或两个以上反应管平行排列，共用一个注入阀和流通检测器。用这种方法将适当分散的试样带储存在管中以增加反应时间，然后依次推入到检测器中。设计平行流动注射分析体系时，必需满足两个条件：（1）流动过程必须易于控制，有停流法那样的精确计时；（2）每个通道必须有相同的几何构型。

平行摇摆振动 rocking vibration 见**弯曲振动**条。

屏蔽常数 shielding constant 由于原子核外电子的运动使原子序为 Z 的核受到一定的屏蔽，这时该核对外界的静电作用力减少到以有效核电荷 Z^* 计。Z^* 可表示为 $Z^* = Z - \sum_i \sigma_i$，$\sigma_i$ 是核外第 i 个电子对核的屏蔽常数。所以 $\sum_i \sigma_i$ 是核外各电子对核的屏蔽作用的总和。

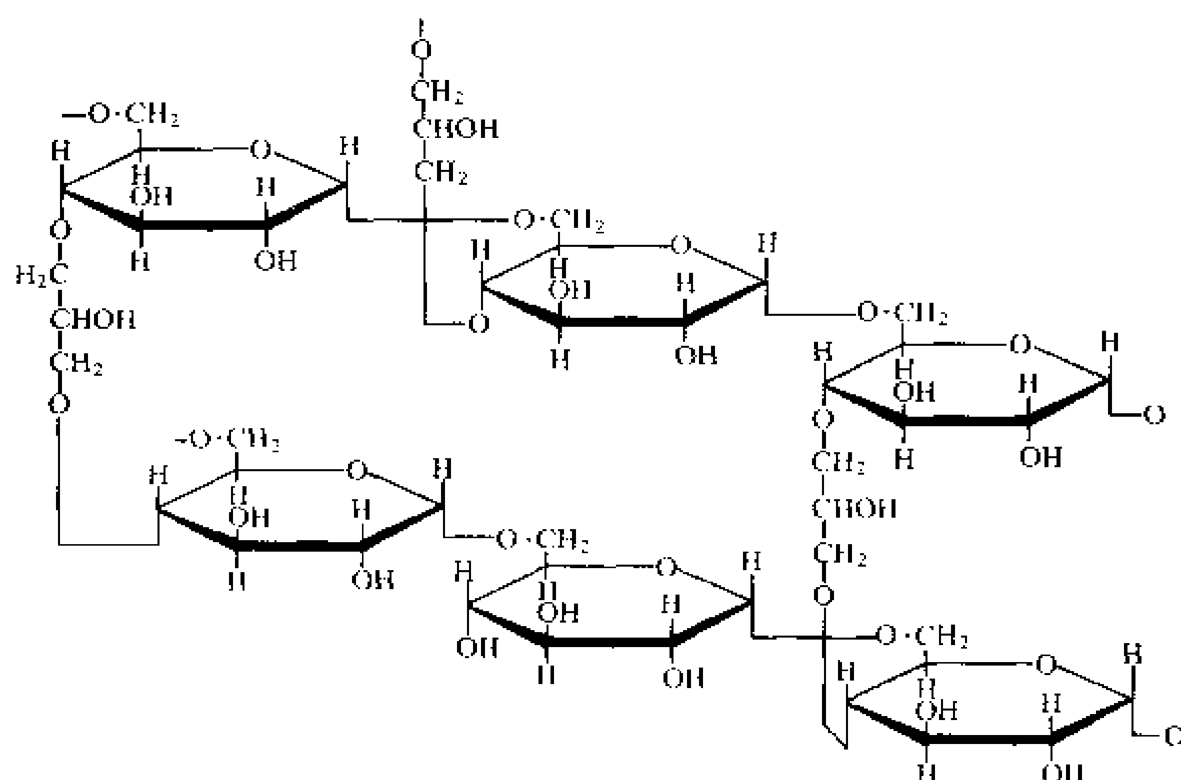
屏蔽火焰 shielded flame 利用惰性气体氮气或氩气在火焰的周围形成屏蔽鞘，以使火焰与周围的大气隔离。屏蔽火焰避免了火焰受到大气的扰动和大气中的氧进入火焰。

屏蔽式等离子体 shielded plasma 屏蔽式等离子体光源是光谱化学分析的一种光源。在一个由感应圈环绕着的充满氩气等易电离气体的石英管内产生这种等离子体。感应线圈接在400kHz到5MHz频率下工作的大电流电源上。为了保护处于等离子体高温气体中的石英管，用12个水冷的铜制屏蔽装置对称地排列在感应管的里面。为了防止在感应线圈的绕组之间由于等离子体的紫外辐射而产生飞弧，采用人字形的屏蔽装置。在相邻屏蔽体之间采用这种交错结构，即可在屏蔽体之间留有一定间隙的情况下，阻断紫外线辐射到石英管和感应线圈上。这种结构可使大功率下的放电直径减小，从而使等离子体与感应管相隔离。这种屏蔽等离子体光源可在大气压的稳定气流中约20kW的功率下形成。

屏蔽双线 sreening doublet 一组特征的X射线荧光光谱双线。由始态（或终态）是两个具有共同的量子数 n 和 J、而量子数 l 相差为1的能级所产生的一对谱线，这种双线因屏蔽常数随 l 值发生一定的变化而得名。

破坏性分析 destructive analysis 样品需要经过破坏，如分解、分离等化学处理后才能进行的分析。特点是精密度和准确度较高，操作比较繁琐。

葡聚糖凝胶 glucosan gel 一种微网孔凝胶，Pharmacia公司的产品，商品名为Sephadex。其基本骨架如图所示。糖链间通过桥相互交联形成三维空间网状结构，如下页图所示。交联剂为环氧氯丙烷，合成时，调节交联剂与葡聚糖的比例及反应条件，则可改变交联度。葡聚糖凝胶主要用于生物分子如蛋白质的分离。分离是按排组色谱机理进行。根据葡聚糖凝胶



孔的大小，又可分成不同型号。根据被分离物质的分子量范围，选择适合的型号的葡聚糖凝胶，达到最佳的分离目的。例如 Sephadex G-10 最适于分离球蛋白的分子量为 700，而 Sephadex G-200 最适合分离球蛋白的分子量为5000～800000。

葡萄糖-6-磷酸脱氢酶活性定量法 assay of C6PD activity G6PD 催化 G6P 变成 6PC，生成 NADPH，后者于 340nm 有一吸收峰。通过单位时间生成 NADPH，换算出 G6PD 活性。25 度正常参考范围：2.8～7.3u·g^{-1}Hb。G6PD 显著缺乏者：0.6u 以下。杂合子：0.7～2.7u·g^{-1}Hb。

葡萄糖传感器 glucose sensor 一种可用于高选择性和灵敏性测定葡萄糖的传感器。通常是将葡萄糖氧化酶固定于转换器表面，基于酶反应过程所导致的 pH、H_2O_2、热效应或颜色的变化可制备出相应的葡萄糖电化学传感器、测热型葡萄糖传感器和葡萄糖光学传感器。

葡萄糖氧化酶-过氧化物酶比色法 glucose oxidase-peroxidase method 血清中的葡萄糖氧化酶能催化葡萄糖氧化成葡萄糖酸，并产生一分子过氧化氢。过氧化氢又被试剂中的过氧化物酶催化放出氧，后者将偶联试剂中的酚氧化并与显色剂 4-氨基安替比林结合成红色醌类化合物。用此法测定血中葡萄糖较为简便，试剂稳定，且无毒。

谱峰面积 peak area 核磁共振谱图谱峰所包含的面积，正比于该基团中所测核的数量。对于一个纯化合物试样的各谱峰面积之比反映了该化合物中各基团中所含被测核的数目之比，利用

它可获得相对分子量的部分信息。

谱扩散 spectral diffusion 假设一个自由基具有各向异性的 g 值或（和）超精细耦合作用，当它在外磁场中处于一个取向时，正好吸收一个微波频率为 ν_0 的光量子而发生跃迁。随后它又缓慢地转动变成另一个取向，在此过程中它并没有发生辐射跃迁，也即它仍处在激发态。而取向的变化使得该自由基中自旋所感受到的有效磁场发生变化，所以跃迁频率会发生变化。只是因该自由基仍处在激发态，暂且不能吸收新频率下的光量子发生跃迁。这种不伴随自由基状态变化的跃迁频率的改变称为谱扩散。当具有磁各向异性的自由基进行很慢的旋转运动时，在发生自旋-晶格弛豫之前就能发生谱扩散。在饱和转移过程中谱扩散起到决定性作用。

谱线半宽度 spectral line half width 谱线轮廓的峰值强度或峰值吸收系数一半处光谱线轮廓上两点之间的频率差或波长差。

谱线的折叠 foldover of peak 当射频频率设在谱图中间时，由于相检波器不能区分相对于射频频率的正负，经傅里叶变换的频谱图上会出现左右对称于射频频率的一对一对谱峰。其中每一对的一支是真实的谱峰，而另一支不是真实的谱峰，称之为折叠峰。若采用正交检波法，而设定谱宽又不够宽时，谱宽外的真实峰将折回设定谱宽范围内，而呈现虚假的折叠峰。

谱线黑度比较法 method of spectral line density comparison 将试样与已知不同含量的标准样品在一定条件下摄谱于同一光谱感光板上，然后在映谱仪上用目视法直接比较被测试样与标准样品光谱中分析线的黑度，若黑度相等，则表明被测试样中欲测元素的含量近似等于该标准样品中欲测元素的含量。该法的准确度取决于被测试样与标准样品组成的相似程度及标准样品中欲测元素含量间隔的大小。

谱线宽度 spectral line width 原子吸收光谱线并不是严格几何意义上的线，而是占据着有限的相当窄的频率或谱线范围，具有一定的宽度。此宽度称为谱线宽度。

谱线轮廓 spectral line profile 谱线包括一定的频率范围，其强度或吸收系数分布是不均匀的，在中心频率处，谱线有最大强度和最大的吸收系数（峰值），在中心频率两侧强度和吸收系数迅速下降，逐渐趋于零。谱线强度和吸收系数的这种按频率的分布分别称为发射光谱和吸收光谱的谱线轮廓。

谱线强度 intensity of spectral line 单位时间内单位体积分析原子发射或吸收辐射的总能量。原子从上能级 j 向下能级跃迁时，其发射谱线强度 I_{ji} 为

$$I_{ji} = A_{ji}N_j h\nu_{ji}$$

原子由下能级 i 向上能级 j 跃迁时，其吸收谱线强度 I_{ij} 为

$$I_{ij} = B_{ij}N_i\rho_\nu h\nu_{ij}$$

式中，N_i 和 N_j 分别是下能级和上能

级的原子布居数；ρ_ν 是频率为 ν 的辐射能量密度；h 是普朗克常数；A_{ji}和B_{ij}分别是自发发射跃迁几率和受激吸收系数，前者表示单位时间内单位体积发射源沿所有方向上发射频率为 ν 的光谱线的总能量，后者表示单位时间内在单位入射辐射密度作用下原子通过受激吸收从低能态 i 跃迁到高能态 j 的几率。A_{ji} 和 B_{ij} 是彼此相关的：$A_{ji}=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}B_{ij}$。

谱线强度相对强度 relative intensity of spectral line 又称线对强度比。采用内标法进行光谱定量分析时，将分析元素和内标元素的谱线组成“分析线对”，两者的强度之比$R=\frac{I_1}{I_2}$（I_1 为分析线的强度，I_2 为内标线的强度），称为分析线对相对强度。在光谱定量分析中，由于试样的蒸发、激发、辐射等条件不能严格控制，致使谱线的强度有波动。用了内标线，在波动的情况下，内标线的强度与分析线的强度同样变化，因而相对强度较为稳定，在同一系统中能给出实际强度，对提高分析结果的准确度有好处，因此一般光谱定量分析多测量相对强度。

谱线增宽 broadening of spectral lines 在实际光谱研究和光谱分析工作中，观测到的原子光谱线的宽度都远比其自然宽度大，这种现象称为谱线增宽。引起谱线增宽的原因大致可归纳为：（1）同位素增宽——由未彻底分离的各种同位素的谱线彼此极靠近甚至部分重叠而使观测到的谱线宽度是各同位素谱线的叠加；（2）多普勒增宽——原子热运动相对于观测点的相对运动速度引起的 Dopple 频移使谱线宽度增加；（3）压力增宽——物质（尤其是气体物质）中激发态原子与同种未激发原子或与异种原子的碰撞而造成的增宽，随压力增大粒子数增多碰撞几率增加、谱线压力增宽更明显；（4）场致增宽——因外电场所致 Stark 效应或外磁场所致Zeeman效应而造成的谱线分裂现象，也会造成谱线增宽（外电、磁场还没强到使谱线完全分裂开时）；（5）谱线自吸增宽——受激原子处在数量多得多的同种基态原子包围中，所辐射的光被基态原子吸收（自吸）而导致谱线强度降低、半宽度增大。

谱线自蚀 spectral line self-reversion 自吸特别严重时，谱线中心几乎完全被吸收，原来的一条谱线几乎分开为两条谱线的现象。参见**谱线自吸**条。

谱线自吸 spectral line self-absorption 元素发射的特征辐射被周围温度较低的同种原子所吸收的现象。自吸的程度随周围原子浓度增高而增大，导致谱线强度降低。谱线中心吸收系数最大，自吸的程度比谱线两翼大，使自吸后的谱线呈现“凹”形，自吸特别严重时，谱线中心几乎完全被吸收，原来的一条谱线几乎分开为两条谱线，这种现象称为自蚀。

谱仪灵敏度 sensitivity 灵敏度和分辨率是X射线光电子能谱的两项主要的指标。是在规定条件下采集标准样品银的计数率来进行评定，即在不同通能下测定 $Ag3d_{5/2}$ 谱峰的计数率，再与规定指标进行比较。谱仪灵敏度反映了谱仪整体的功能，关系到仪器的检测极限。它无论对提供化学状态信息的定性分析，还是测量以谱峰强度为主的定量分析都是至关重要的。

Q

期望方差 expected variance 又称预期方差。是无限多次测量得到的方差。在有限次测量中，得到方差估计值 S^2，它是总体方差 σ^2 的无偏估计值，其期望值 $D(x)$ 等于总体方差 σ^2。

期望值 expectation value 无限多次测量的统计平均值。随机变量 x 的期望值 $E(x)$ 等于总体的平均值 μ，是 x 按概率加权的加权平均值，表征一组测量值概率分布的中心位置。

齐默曼反应 Zimmerman reaction 17-氧类固醇与间二硝基苯在强碱条件下产生紫红色化合物的反应。利用此反应做17-氧类固醇的定量测定。也可将17-羟类固醇经化学转变成17-氧类古醇后进行定量测定。

奇电子离子 odd-electron ion 具有未配对电子的离子，例如，分子离子 $M^{\dot{+}}$。在质谱中，这样的离子同时又是自由基，具有较高的反应活性，在质谱图的解析中较为重要。

起始密码 initiation code 蛋白质生物合成的起始位点。其核苷酸三联体为AUG或GUG，被携带蛋氨酸的tRNA分子上的反密码所识别并相互结合。以真核细胞mRNA为模板的翻译起始于最靠近其5′端第一个AUG密码，此即所谓“第一AUG规律”，统计资料表明90%～95%的真

核 mRNA 符合此规律。当正常起始密码上游再引入一个带有最适旁侧序列的 AUG 时，若其阅读框架保持一致，则翻译在这个 AUG 起始。对于大多数核糖体，只要第一个 AUG 的 3 位为 A，肽链合成总是在这个 AUG 起始。在高等真核细胞中，一些原癌基因和生长调节因子基因所产生的 mRNA 5′非翻译区中存在一个以上的 AUG，其翻译起始并不遵循"第一 AUG 规律"。

气动泵 pneumatic pump 以气体作为动力推动活塞工作的高压泵。气动泵能提供无脉冲的、稳定的液流，适合于色谱分析体系。利用气动放大原理的气动放大泵能迅速获得所需的高出口压力和提供大的输出流量，特别适合于匀浆法填充色谱柱。气动泵的缺点是液缸体积大，更换流动相不方便，如果不使用两台这样的泵无法实现梯度洗脱。

气动雾化器 pneumatic nebulizer 又称同心雾化器。是广泛用于商品仪器中的一种雾化器，由两层同心管组成，内层吸液毛细管位于外管喷嘴的中央，两者之间形成环形喷口。当速度达到和超过音速的载气气流由环形喷口（文丘里型喷嘴）喷出时，基于流体力学原理形成负压，空吸作用使试液沿毛细管上升，由内管上端口高速喷出，将试液分散形成细小的雾珠和气溶胶。在火焰原子吸收光谱分析中，只有直径小于 20μm 的气溶胶在通过火焰区的短时间内能有效地原子化。为使气溶胶粒子进一步细化，在预混合型原子化器的雾化内喷雾器的前端 2～3mm 处安装一个碰撞球或扰流器，或同时安装雾化球和扰流器。当由雾化器出来的气溶胶撞击在雾化球和扰流器上，进一步细化为平均直径更小的气溶胶。同心雾化器的优点是结构简单，价格便宜，使用方便，应用广泛。缺点是因雾化毛细管很细，容易造成堵塞，不适合用于高含盐量溶液。表征雾化器特性的参数有试液提升量、雾化效率和气溶胶粒度分布。雾化效率直接影响元素的测定灵敏度，同心雾化器的雾化效率约为 10%～15%。

气-固色谱法 gas-solid chromatography；GSC 是指以气体作为流动相（称为载气），以固体吸附剂作为固定相的气相色谱法。作为固定相的固体吸附剂，通常是用各种多孔性物质，例如分子筛、硅胶、活性炭、碳分子筛、氧化铝以及高分子多孔小球等。一般气-固色谱法的分离机理为吸附-脱附，故属于吸附色谱法。但在以高分子多孔小球作固定相的气-固色谱中，是吸附和分配兼而有之的色谱法。

气溶胶 aerosol 分散在气体介质中，以液体或固体微粒为分散相、粒径大部分小于 1μm 的微粒。它具有胶体性质，对光线有散射作用。气溶胶在气体介质中作布朗运动，不因重力作用而沉降。根据气溶胶物理状态的不同，可分为烟、煤烟、雾、浓雾和烟雾等。烟是固态气溶胶。物质在高温下蒸发、升华以气态散布于空气

中，冷凝成为粒径在0.0001～0.5μm之间的固体微粒，如铅烟。煤烟是燃料不完全燃烧所产生的疏状碳粒，粒径为0.01～1μm。雾是液态气溶胶，当温度降低时，局部过饱和的蒸气状污染物冷凝成极微小的液滴，液滴表面又包着一层蒸汽薄膜，悬浮于大气中，如硫酸雾。液雾也是液态气溶胶，是液体飞溅、喷射所造成的。烟雾是固液混合态气溶胶，具有烟和雾的两重性。

在一些原子光谱文献和书中，将雾化器喷雾试液产生的粒径很小的雾状液珠也称为“气溶胶”。一般气动雾化器产生细分散的雾珠的平均粒径约为十几微米量级，粒径≥20μm占了总试液量的大多数，粒径≤5μm的在雾珠数中占了大多数，而粒径≤1μm的不论占雾珠数还是占试液总量都是极小的。雾化器所产生的粒径很小的雾珠只是一种“拟气溶胶”，而不是真气溶胶。从严格的意义上讲，将雾化器喷雾产生的粒径很小的雾珠称为“气溶胶”是不确切的。

气体电离探测器 gas-ionization detector 通过收集射线在气体中产生的电荷来测量核辐射的一种测量仪器。主要类型有电离室、正比计数器和盖革-弥勒计数器，三者结构相似。电离室工作电压较低，直接收集射线在气体中产生的原始离子对，输出脉冲幅度较小，用于辐射剂量和能谱测量。正比计数器的工作电压较高，原始离子对在电场内受到加速，产生更多的离子对，获得较高的脉冲输出，脉冲幅度正比于入射粒子损失的能量，用于能谱测量。盖革弥勒计数器工作电压更高，产生多次电离过程，输出脉冲幅度很高，可以不经放大直接记录，用于记录脉冲数目而不能测量能量。

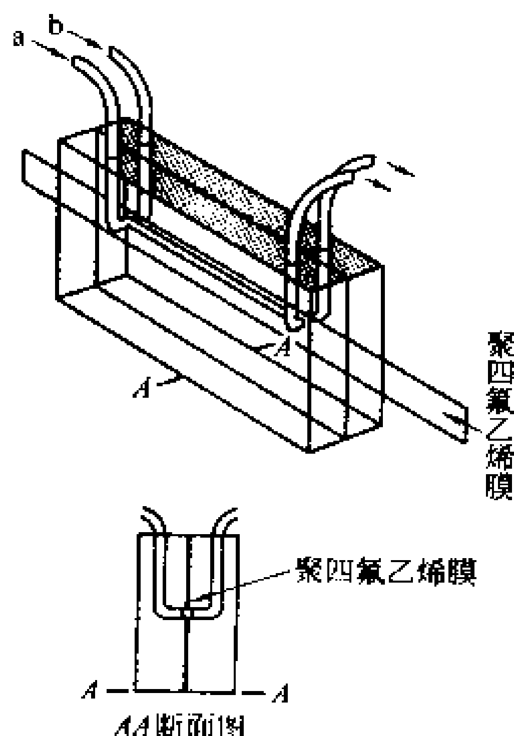
气体放大 gas amplification 在充气检测器中，入射的X射线光子引起气体分子的初级电离，所产生的电子在外加电场作用下获得足够的动能，再与气体分子碰撞而引起次级电离的连锁过程。通常把气体放大后，电离总数N与初级电离数N_0之比叫做气体放大因子。外加电场越强，所引起的次级电离就会越多，因此气体放大因子随外加电压的增加而增大。根据气体放大因子与外加电压关系曲线上的转折点可将工作电压分为电离室区、正比区及盖革计数器区。各种气体检测器在相应的工作电压区域中工作。

气体分子的纯转动光谱 pure turning spectrum of gas molecule 具有永久偶极矩的气体分子的纯转动光谱位于远红外区或微波区。转动光谱通常采用微波光谱测量，用微波光谱可以研究转动光谱的超精细结构。由于微波技术在其高频端只能达到20cm^{-1}左右，而高分辨率的远红外傅里叶变换光谱技术低频端的测定可达4 cm^{-1}，两种技术互补可共同研究分子转动光谱精细结构。

气体红外光谱检测 gas infrared spectrograph 以窄带滤光器代替色散元件的红外分析仪器监测方法。与红

外分光光度法比较，具有所用仪器结构简单、操作简便、价格低廉等优点，但不具备分光分析的功能。可监测大气和汽车排气中的一氧化碳、一氧化氮和二氧化硫等。

气体扩散装置 gas diffusion unit 是由两块具有扩散槽和输入、输出接口的有机玻璃，和夹在中间的一张微孔膜组成的，见下图。主体为有机玻璃块，扩散膜为聚四氟乙烯膜。通常扩散槽深 0.2mm，宽 2mm，长 100mm。常用的膜有聚四氟乙烯微孔膜（厚 0.076mm，平均孔径 0.2μm，孔隙率为 78%），聚丙二醇微孔膜和无孔二甲基硅橡胶膜等。凡能转化成挥发性气体成分的，如 CO_2、SO_2、HCN、HF、H_2S 和 NH_3 等，均可借助此技术进行分离测定。有很高的选择性，膜的转移效率通常不超过 30%。



气体密度天平检测器 gas density balance detector 是一种利用样品蒸气与载气密度的差异来进行检测的气相色谱检测器。检测器主体是热丝或热敏电阻，组成惠斯通电桥的两臂，当色谱柱后流出气体的密度与载气相同时，检测元件的电阻无变化，没有信号输出。当色谱柱流出物中含有与载气密度不同的痕量物质时，惠斯通电桥就不平衡，输出的电信号被记录下来。在气体密度天平检测器里，敏感元件不与色谱柱后流出气体相接触，因而对腐蚀性气体的检测很有利。最小检测量 10^{-8} g，线性范围为 10^5。

气体敏感膜电极 gas-sensing electrodes 又称气敏电极。是将指示电极和参比电极装在一个腔体内组成的完整的电化学电池。它主要由憎水的气透膜、内电解质溶液、指示电极和参比电极组成。其测定原理是基于一些气体溶于水溶液中生成了能用离子选择性电极检出的离子。电极用于测定时，样品中的被测气体通过气透膜与内充电解液达到平衡，在膜和离子选择性电极之间的薄层溶液中，气体发生化学反应，消耗或产生一种可被离子选择性电极检测的离子，离子的活度与样品中溶解气体的量成正比，因此，电极的响应与样品中气体的浓度直接相关。气敏电极已获得较多的应用，CO_2 气敏电极用在临床化验，如血的分析，NH_3 气敏电极用在电厂水汽系统监测，印染厂污水和氮肥厂空气监测，以及硝酸盐用节瓦尔德合

金还原为氨后的分析。SO_2气敏电极用于石油产品的分析，氢氰酸电极用于农药生产废水分析等等。

气味采样 odor sampling 气味采样用聚四氟乙烯袋或聚酯袋，或具有相同保存性能的试样采集袋用直接采样的方式采集现场空气。采样时，袋内应该保持干燥，用现场空气充放2～3次后正式采样，取样后将进气口密封。采样袋的外部，最好用铝箱和铝箔遮光保护。采样后，试样可保存12h左右。

气味测量计 centmeter 见**动态气味测量仪**条。

气雾剂取样法 aerosol sampling method 方法有三种：（1）将气雾剂喷射罐置于干冰-丙酮浴（－70℃）中30min以上，使异丁烷发射剂液化（沸点－11.7℃），自干冰浴中取出，在通风橱内，用铁钉在罐上打一小孔，再缓慢回复至室温过程中，异丁烷蒸发，将罐超声处理约5min，以除去残留气体，即可取样分析；（2）将罐缓缓振摇，倒置，将阀浸入含适量吸收溶剂（如乙醇）的烧杯中，将阀压在烧杯底，使之打开15s，将容器轻轻振摇，回复至室温，再同法喷射，直至全部耗尽，将溶液定量转移，稀释，即可取样分析；（3）在喷口上接一长软管，伸入含溶剂底量瓶球部，喷射若干次，由减重法得知取样量。

气相传质阻力 resistance of gas mass transfer 指溶质分子由流动相扩散到气液界面进行浓度分配，达到平衡后再返回流动相的传质阻力。从流动相到两相界面传质阻力越大，所需扩散时间就越长，因而引起区域的扩展。气相传质阻力在使用较大量的固定液也即液膜较厚时，其影响并不明显。但在高效快速色谱中，载气流速较高，固定液用量较低，此时的影响就不可忽视。参见**传质阻力**条。

气相化学发光 gas-phase chemiluminescence 发生化学发光反应时反应物的状态为气体的化学发光为气相化学发光。气相化学发光反应包括的范围非常广泛。用于分析化学的气相化学发光大致分为三种类型，即室温下的均相反应、火焰均相反应和气-液或气-固表面异相反应。气相化学发光分析具有的选择性、简便性及仪器的便携性，使得它成为一种极为诱人的新技术。

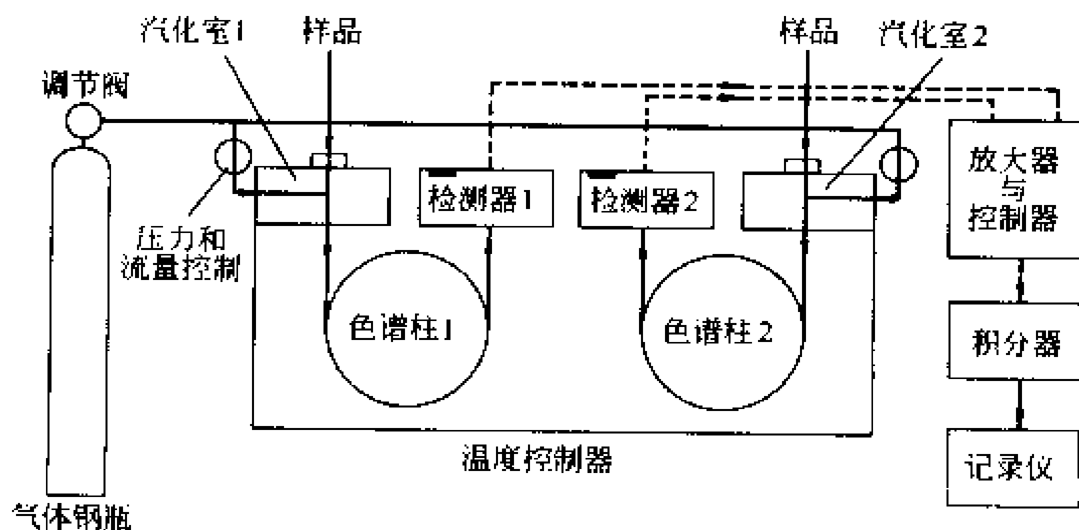
气相色谱法 gas chromatography; GC 以气体作为流动相的色谱法。根据所用固定相状态的不同，又可分为气-固色谱法和气-液色谱法。前者用多孔型固体为固定相，后者则用蒸气压低、热稳定性好、在操作温度下呈液态的有机或无机物质涂在惰性载体上（填充柱）或涂在毛细管内壁（开口管柱）作为固定相。气相色谱法的优点是：分析速度快，分离效能高，灵敏度高，应用范围广，选择性强，分离和测定同时进行。其局限性在于不能用于热稳定性差、蒸气压低或离子型化合物等的分析。

气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术 gas chromatography-Fourier transform infrared spectrometer; GC-FT-

IR 气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术是20世纪80年代以来发展起来的一种新技术。GC-FTIR系统由气相色谱单元、接口和FTIR单元组成。其中接口是联用系统的关键部分，主要为镀金光管接口。GC-FTIR的联用是将色谱柱的出口直接与红外光谱仪的接口连接，让色谱馏分依次通过样品池（接口镀金光管），进行红外的快速检测。其最低检测量为数百甚至数十微克。目前，GC-FTIR已经成为复杂有机混合物分析不可缺少的工具之一，在环保、医药、香料、食品、化工和石油领域中得到广泛的应用。

气相色谱-红外光谱联用仪 chromatograph coupled with infrared spectrophotometer 将色谱的高效分离能力与红外光谱可对分子结构提供较多信息的特点相结合的一种仪器，是对多组分混合物进行结构分析的有力手段。它的工作原理是：多组分混合物样品经过气相色谱柱分离，得到各个单一组分，按保留时间顺序逐一进入红外光谱测量区进行检测，经快速扫描后，给出各单一组分的相应红外光谱图。根据所得各红外光谱图与标准谱图对照和谱图解析的结果，可以对这些单一组分进行定性分析。由于气相色谱中进样量较少，而且相邻两组分流出的时间间隔较短，因此要求红外光谱仪的灵敏度要高、响应要快。

气相色谱仪 gas chromatography 实现气相色谱分离、分析的一种仪器设备。如下图所示，它的最基本组成包括载气控制、调节系统（提供稳压、稳流的流动相），进样系统，分离系统（色谱柱），检测系统，信号记录、处理系统及温度控制系统。根据分析任务的要求，可对气相色谱仪的各个系统进行有效的组合，如对载气采用机械控制或电子控制，进样可手动/自动或分流/不分流，分离可采用填充柱、制备柱或毛细管柱，检测可用不同类型的检测器，信号记录和数据处理可采用电位差计、积分仪或色谱工作站。



气相色谱仪原理图

气相色谱-质谱联用仪 gas chromatograph-mass spectrometer 将气相色谱仪的高效分离能力与质谱仪的高灵敏度检测、高鉴别分子结构的能力相结合的一种仪器，它是分析复杂有机混合物非常有效的工具。它的工作原理是：多组分混合物样品经过色谱柱分离，得到各个单一组分，按保留时间顺序随同载气逐一进入质谱仪的离子源，单组分样品被电离成碎片（离子），经质量分析器和检测器检测，可给出单一组分的质谱图，根据对所得质谱图进行计算机检索和谱图解析的结果，便可以对这些单一组分进行定性、定量分析。

气相色谱专家系统 expert system of gas chromatography 一个具有大量气相色谱分析方法的专门知识和经验的计算机软件系统。它应用人工智能技术，根据色谱专家提供的专门知识和经验进行推理和判断，模拟色谱专家来解决那些需要专家才能解决的气相色谱问题。如中科院大连化学物理研究所研制的专家系统（ESC 系统）包括色谱分离模式的推荐；气相色谱柱系统及样品预处理方法的推荐；气相色谱操作条件最佳化；气相色谱在线定性、定量分析等主要内容。

气-液色谱法 gas-liquid chromatography; GLC 是指以气体为流动相（称为载气），以液体为固定相的气相色谱法。作为固定相的液体（称为固定液）应是蒸气压低、热稳定性好、有较高操作温度的有机或无机化合物。将它们涂渍在惰性载体上作为填充柱的固定相，或直接涂渍在毛细管内壁（开口管柱）作为固定相。气-液色谱法的主要分离机理为溶解-解析作用，故属于分配色谱法。

气-质联用仪 gas chromatography-mass spectrometer; GC-MS 将气相色谱仪与质谱仪组合成的分析装置。在气-质联用仪中，气相色谱仪用来分离被分析物，质谱仪用来检测被分析物，给出被分析物的分子量和可能结构。由于气相色谱要求样品首先被气化，然后进入色谱柱进行分离，所以气-质联用仪适合用来分析小分子、易挥发、热稳定的化合物。它通常使用电子电离源来使样品电离，操作条件稳定，得到的质谱图可以与标准谱库比较，因此是应用最广的一种分析仪器。

汽化室 vaporizer 是为液体或固体样品进行汽化的装置。汽化室温度与样品组分中最高沸点、进样量、进样方式及进样器结构有关。当汽化室温度低于样品的沸点时，样品汽化的时间较长，使样品在柱内分布加宽，因而使柱效下降。当汽化室温度足够高时，样品可以瞬间汽化，其柱效恒定。用峰高定量时汽化室温度影响很大，如汽化室温度低于样品沸点时，峰高就降低。因此在用峰高定量时，汽化室温度要尽可能高于样品各组分的沸点。当然，如果汽化室温度过高时，也会导致样品的分解。

迁移电流 migration current 一个离子型的电活性物质在指示电极或工作电极上还原或氧化时，由于电迁移

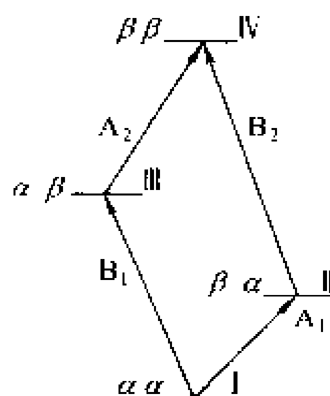
达到电极而产生的电流。其符号规定：对阳离子的还原或阴离子的氧化，电流为负值；对阳离子的氧化或阴离子的还原，电流为正值。因此，迁移电流或使总电流增大，或使总电流减小。总之，增加支持电解质的浓度，因而增加溶液的电导，可减小电活性离子的迁移数，能使迁移电流降低趋近于零。

迁移时间 migration time 组分从起始位置迁移到终止位置所需的时间，在电泳中，是指组分从进样口迁移至检测点所需的时间。

迁移时间窗口 the window of migration time 亦称流出范围。是指完全溶于水流动相的中性溶质的迁移时间与完全溶于胶束中的溶质迁移的时间间隔。

迁移数 transference numbers 流过电解质溶液的电流分别由阳离子和阴离子导通，各种离子传送电流的能力不一定相同，它们之间总的比值叫迁移数。

前进式跃迁与反射式跃迁 progressive transitions and regressive transitions 核自旋量子数 $I=\frac{1}{2}$ 的二核自旋体系 AB，具有 4 个自旋能级 Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ、Ⅳ，其中 AB 核分别处于 $\alpha\alpha$、$\beta\alpha$、$\alpha\beta$ 及 $\beta\beta$ 的自旋状态。它们之间可能发生 4 种跃迁：A_1、A_2、B_1、B_2。如右图所示，其中跃迁 A_1 与 B_2 共享一个能级Ⅱ，而 B_1 与 A_2 共享一个能级Ⅲ，因此两个跃迁都涉及到一个"接力站"（分别为Ⅱ、Ⅲ），这两种跃迁的关系称为前进式跃迁或曰接力跃迁。而 A_1 与 B_1 是同时由能级Ⅰ出发，A_2 与 B_2 则同时向能级Ⅳ跃迁，这两种跃迁关系皆称为反射式跃迁或曰歧路跃迁，也称返回式跃迁。在前进式的跃进中磁量子数的改变为 $\Delta M_1=2$，在反射式跃迁中磁量子数的改变为 $\Delta M_1=0$。



二核AB自旋体系

前手性基团中核的不等价 nuclear nonequivalence in prochiral group 见**手性基团**条。

前向散射 forward scattering 光在传播过程中遇到尺寸与光波长大小可比拟的微粒时，会在微粒上发生散射，散射光是向四面八方射出的，各方向散射光的强度可以相差无几，也可有明显的差别。当微粒尺寸比光波长稍大，微粒的形状接近球形时会发生米氏（Mie）散射，在入射光行进方向（前向）的散射光强度会比其他方向散射光更强，这种向前方的明显散射称为前向散射。在散射光分析工作中，往往利用小角度前向散射光强度大的特点，获得更高的检测信噪比。

前行反应 preceding reaction 化

学反应在电极反应前进行，化学反应的产物参与电极反应。

前延峰 leading peak 又称伸舌头峰。是色谱峰形前沿平缓而后沿陡峭的不对称色谱峰。这种峰形在色谱分析中不经常出现，但在吸附色谱中，当吸附等温线为向上弯曲类型时，对应的色谱峰可能就是前延峰。

前沿色谱法 frontal chromatography 又称迎头色谱法。是指以样品溶液为流动相，连续流经色谱柱，使样品组分达到分离的色谱方法。在固定相上吸附（保留）最弱的组分最先以纯物质流出，其次是保留第二弱和最弱的两个组分的混合物流出色谱柱，依次类推。该方法只适合于简单混合物的分离。

潜像 latent image 乳剂曝光后，在受光照射的地方，产生一定数量的显影中心，显影中心虽然是银质点，但是由于这些质点很小，不能显示乳剂在曝光后所产生的影像，要想获得乳剂曝光后产生的影像，必须经过显影，使曝光的卤化银（具有显影中心的卤化银）在显影剂的作用中，还原成银，以显示影像，因此，乳剂曝光后在显影前所得的是由许多显影中心组成的看不见的“影像”，称为“潜像”。

强碱性阴离子交换剂 strong-base anion exchanger 离子交换功能基团为强碱（如季铵）基团的阴离子交换剂。常见无机阴离子分析大多采用这种填料。

强碱性阴离子交换树脂 strong-base anion exchange resin 树脂中功能基为季铵基的一类阴离子交换树脂。其骨架多为交联聚苯乙烯，在傅氏催化剂，如 $ZnCl_2$、$AlCl_3$、$SnCl_4$ 等存在下，通过使骨架上的苯环与氯甲醚进行氯甲基化反应，再与不同的胺类进行季铵化反应制得。季铵化试剂有两种，使用三甲胺等第一种季胺化试剂得到Ⅰ型强碱性阴离子交换树脂，其碱性很强，当用氢氧化钠使树脂再生时效率较低；为了降低其碱性，使用二甲基乙醇胺等第二种季铵化试剂，得到Ⅱ型强碱性阴离子交换树脂，其耐氧化性和热稳定性较Ⅰ型树脂略差。

强煤 strong pitch ESR 标准样品煤样的一种，一般用于确定样品的 g 值。因相对于弱煤样品而言，其煤炭含量较高（KCl 中含 0.11% 的煤），故称为强煤。其 g 值为 2.0028。

强耦合系统 strong coupling systemAB，A_2B，A_2B_2，ABX，ABC，AA'BB'系统等属于强耦合自旋体系。它们的化学位移 δ 与耦合常数 J 比较相近，属同一数量级，这时一级谱规则不能适用，δ 与 J 值皆不能从谱图上直接读出，它们都属于复杂谱之列。值得注意的是由于体系的耦合常数不随外加磁场强弱而变化，谱峰化学位移的差值（以 Hz 来表示，即绝对共振频率）却随磁场强度而变化，当外加磁场场强越强时则 $\Delta\delta$ 越大。因此在低磁强的仪器下的复杂谱在高场强下有可能为简单的一级谱，利用此可简化谱图而便于分析。

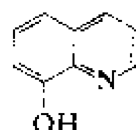
强酸性阳离子交换剂 strongly acidic cation exchanger 离子交换功能基团为强酸（如磺酸）基团的阳离子交换剂。它是阳离子交换色谱常用的柱填料，特别适合碱金属离子的分离。在离子排斥色谱法中用作弱酸阴离子的离子排斥分离固定相。

强酸性阳离子交换树脂 strong-acid cation exchange resin 树脂中功能基为磺酸基—SO_3H 的一类阳离子交换树脂。以苯乙烯和二乙烯苯共聚体为基础的磺酸型树脂是最常用的强酸性阳离子交换树脂，它在碱性、中性乃至酸性介质中都有离子交换功能。单体苯乙烯与交联剂二乙烯苯共聚得到的球状基体称为白球。白球用浓硫酸或发烟硫酸磺化，在苯环上引入一个磺酸基。磺化后的树脂为 H^+ 型，为贮存和运输方便，往往转化为 Na^+ 型。Na^+ 磺酸型树脂是常见的强酸性阳离子交换树脂。

强制检定 compulsory verification 由政府计量行政主管部门所属的法定计量检定机构或授权的计量检定机构，对社会公用计量标准，部门和企业事业单位使用的最高计量标准，用于贸易结算、安全防护、医疗卫生和环境监测四方面列入国家强检目录的工作计量器具，实行定点定期的一种检定。

7-羟基-4-甲基香豆素 7-hydroxy-4-methyl-coumarin 一种有机染料，用作激光激活介质。以甲醇为溶剂，当其浓度为 1×10^{-2} mol · L^{-1}时，可得到 380 ~ 420nm 范围内的可调谐单条激发线，用作共振拉曼光谱研究中的染料激光光源。

8-羟基喹啉 8-hydroxyquinoline 别名喹啉醇或喔星（oxine）。分子式 C_9H_7NO。



为无色晶体或晶状粉末，熔点 74 ~ 76℃，约 32℃ 升华。几乎不溶于水和乙醚，易溶于无机酸、乙醇、丙酮、乙酸、氯仿、苯等。溶于无水溶剂时溶液无色，若有水分存在即成黄色。8-羟基喹啉固体或溶液都很稳定，但应置于暗处。试剂的 K_a = 1.95×10^{-10}，K_b = 8.32×10^{-10}。可与各种金属离子反应生成 5 元环螯合物，常用作溶剂萃取试剂、萃取光度试剂以及许多金属离子（除一价阳离子外）的沉淀剂。Al，Ga，In，Mg，Zn 等金属的 8-羟基喹啉盐具有强荧光。

羟基振动频率 hydroxyl group frequencies 醇、酚、糖和苷等分子中均含有羟基（—OH）。羟基的特征峰包括 O—H 的伸缩振动（ν_{OH}）；—O—H 的弯曲振动（δ_{OH}）和碳氢键的伸缩振动（ν_{C-OH}）等特征峰。O—H 的伸缩振动（ν_{OH}）在 3670 ~ 2500cm^{-1} 波数范围内。羟基可形成分子间或分子内氢键。当羟基在分子间缔合时，形成以氢键相连的多聚体，键力常数 k 值下降，因而红外吸收位置移向较低波数（3300cm^{-1}附近），峰形宽而钝。羟基在分子内也可形成氢键，使羟基红外吸收也移向低波数。羧酸内由于羰基

和羟基的强烈缔合，吸收峰的底部可延续到约 2500cm^{-1}，形成一个很宽的吸收带。O—H 的弯曲振动（δ_{OH}）和碳氧键的伸缩振动（ν_{C-OH}）在 1410～1000cm^{-1} 波数范围内。醇在 1100cm^{-1}波数附近，酚在 1230cm^{-1}。

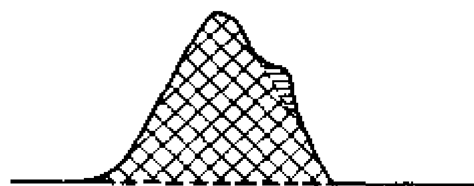
鞘流池 sheath flow pool 一种毛细管电泳-质谱联用的接口装置。通过该接口不仅可建立毛细管末端（低电位端）的电接触，又可增大进入离子化器时的流速。

鞘流液 sheath flow liquid 在毛细管电泳-质谱联用的鞘流接口装置中，采用液体鞘流技术建立毛细管末端的电接触，同时又增大进入电喷雾离子化器的流速。鞘流液一般由含高浓度有机溶剂（甲醇、乙腈）的水溶液组成。

切光器 chopper 一种调制光源光束频率的机械装置，由上面开有两个相对的扇形开口的金属圆板和一个驱动它的小电动机组成。扇形板转动时，按一定频率遮断来自光源的光束。当检测-放大线路调谐到切光频率，则可以检测和放大经过调制的光信号，而不放大非调制信号。因此，可以消除分子吸收和发射、光散射等信号测量的影响。

切换时间 switching time 在采用色谱柱切换技术时操作切换阀门等部件的时间。切换时间取决于第一色谱柱（先有组分流出的柱子）中被分离组分最后流出的时间和第二色谱柱（后有组分流出的柱子）中被分离组分最先流出的时间，一般取二者的平均值作为切换时间转换连接两柱的阀门，以实现色谱柱的切换功能。参见**色谱柱切换技术**条。

切线切割法 tangent incision method 用手动或自动积分仪测量峰面积时所采用的一种近似方法。对于两个不能完全分离峰的峰面积测定，如果两相邻峰的峰高相差较大时（大约 5 倍以上），即峰高较小的峰呈现“肩峰”的形式，可采用作切线的方法将小峰与大峰分割开（如下图所示），分别积分得到两峰的峰面积。



切线分割

亲电试剂 electrophilic reagent 指在有机化学反应中容易攻击反应物电子云密度较大的部位的试剂。换言之，亲电试剂是指容易从反应物夺取电子，或共享电子进行反应的一类试剂。酸、氧化剂、阳离子等都是亲电试剂。例如，$[Fe(CN)_6]^{3-}$，$SnCl_4$，Al_2O_3 等氧化剂，硝化试剂中的 NO_2^+，H_3O^+，$C_6H_5N^+\equiv N$，卤素，硫酸等均为亲电试剂。

亲硅醇基效应 silanophilic interaction 指极性溶质在硅胶基质固定相上因静电作用或氢键作用而与硅胶表面残余硅醇基发生相互作用的现象。尽管溶质与功能基团的作用是主要的，但亲硅醇基效应对极性溶质的保留往往产生不可忽略的影响。

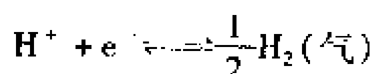
亲和色谱法 affinity chromatography 以共价键将具有生物活性的配位体（如酶、辅酶、抗体、激素等）结合到不溶性固体基质（载体）上作固定相，利用蛋白质或生物大分子等样品与固定相上生物活性配位体之间的特异亲和力进行分离的液相色谱方法。亲和色谱主要用于蛋白质和生物活性物质的分离与制备。

亲核试剂 nucleophiles 根据酸-碱电子（Lewis）理论，有机化学中，常将那些能提供电子的Lewis碱，反应中可提供一对电子给碳原子而形成共价键的有机试剂称为亲核试剂。

氢灯 hydrogen lamp 充有氢气的气体放电灯，主要用于紫外区，可提供185～440nm范围内很强的紫外连续光谱辐射，不同的氢灯的辐射特性取决于充氢压力、灯壳材料及其电气参数等。在光谱分析工作中，氢灯可作为紫外-可见分光光度计中的紫外光源，也可用作原子吸收分光光度计中的扣背景光源（但目前更常用强度更高、稳定性更好的氘灯）。

氢电极 hydrogen electrode 用镀有铂黑的铂薄片浸入由氢气饱和的氢离子溶液中即成气体氢电极。因氢气不能直接用作电极，故用铂电极以吸附氢气。电极上的反应

$$H^+ + e \rightleftharpoons \frac{1}{2}H_2(气)$$



$$E_H = E_H^\ominus + \frac{RT}{F}\ln\frac{a_H}{\sqrt{P_{H_2}}}$$

式中，a_H 表示溶液中氢离子活度；P_{H_2}表示溶液上氢气的分压；F 为法拉第常数；R 为气体常数；T 为热力学温度。氢电极测得的电位是溶液上氢气分压的函数，因此含氢电极电池的电动势，通常是要校正到101325kPa（760mmHg）氢的分压。如果氢电极是电池的负极（在pH值测定中氢电极总是负极），电池的电动势是随氢分压增加而增加的，所以校正值是加到所观察到的电动势上。氢电极除在水溶液中使用外，还可用于乙醇和冰乙酸中。在下述情况不能使用：（1）溶液中含氧化剂如 O_2、CrO_4^{2-}，Fe^{3+}；（2）溶液中含在电极表面上被还原析出的金属如Ag，Hg，Cu，Pb，Cd，Tl及还原作用强的物质如肼、甲醛等；（3）含吸附性物质的溶液如 CN^-、溴、硫的化合物，胶状杂质、蛋白质等。

氢化物发生法 hydride generation；HG 原子光谱法中的一种重要的进样方法。它利用化学或电化学还原法将被测元素转变为气态氢化物，然后引入到原子化器中、用原子光谱法检测分析元素。它的优点是，在氢化物发生过程中，分析元素与基体元素分离并得到富集，因此一般不受试样中存在的基体的干扰，能获得高的信噪比和很低的检出限；进样效率高，具有很高的灵敏度；基于分析元素不同价态和形态的氢化物发生行为的差异，可分别分析元素的不同价态和形态。发生氢化物最广泛使用的还原剂是硼氢化钠和硼氢化钾。它主要用于Ge、Sn、Pb、As、Sb、Bi、Se、Te、In、Tl等元素的测定。因检测分析元

素所用的原子光谱方法不同，相应有氢化物发生-原子吸收光谱法，氢化物发生-等离子发射光谱法，氢化物发生-原子荧光光谱法。

氢化物发生器 hydride generator 用来发生 Ge、Sn、Pb、As、Sb、Bi、Se、Te、In、Tl 等元素气态氢化物的装置。它有四种基本类型：间断式发生器，连续流动发生器，流动注射发生器和断续流动发生器。参见**氢化物发生法**条。

氢化物发生-原子吸收光谱法 hydride generation-atomic absorption spectrometry；HG-AAS 用氢化物发生法进样，原子吸收光谱法检测分析元素的一种原子光谱法。它将氢化物发生法高的分离富集效率和高的进样效率，与原子吸收光谱法高的检测灵敏度和专属性的优点结合在一起，具有很高的灵敏度和很低的检出限，可以达到 ng 至 pg 级。能有效地用来测定 Ge、Sn、Pb、As、Sb、Bi、Se、Te、In、Tl 等元素。

氢化物发生-原子荧光光谱法 hydride generation-atomic fluorescence spectrometry；HG-AFS 用氢化物发生法进样，原子荧光光谱法检测分析元素的一种原子光谱法。它将氢化物发生法与原子荧光光谱法的优点结合在一起，有很高的分离富集效率和进样效率，很高的灵敏度和很低的检出限，工作曲线动态范围宽，能同时进行多元素测定。能有效地用来测定 Ge、Sn、Pb、As、Sb、Bi、Se、Te、In、Tl 等元素。

氢火焰离子化检测器 flame ionization detector；FID 又称火焰电离检测器。氢火焰离子化检测器是由喷嘴、点火线圈、极化极、收集极等构成。它的工作原理是：当氢气和空气混合进入喷嘴经点火形成氢火焰时，利用有机化合物在氢火焰中发生化学电离产生含单碳的正离子（离子化效率为 10^{-5}），其形成的离子流由收集极收集，再经放大和高电阻后，将电流信号变成电压信号输出，经记录仪记录得到色谱图。绝大多数有机物都在该检测器上有很高的响应，响应值基本上与有机物中含碳原子的数目成比例。氢火焰检测器灵敏度高，最小检测量约为 10^{-12}g，线性范围宽，约达 10^7 ~ 10^{12}。为保持 FID 良好的性能，所用的气体都必须是纯净的，否则噪声和基流都会增大。

氢键相互作用力 hydrogen bound interaction force 一种重要的分子间相互作用力。当分子中氢原子与电负性大的原子 X 成键时，还可以吸引另一个电负性大的原子 Y（Y 与 X 可以在同一分子内，也可在不同分子内），形成氢键：—X—H…Y—，式中…代表氢键。在—X—H…Y—中，X—H 是共价键。但当 X 的电负性较大时，X 强烈吸引氢原子核外电子云，使氢核几乎成为裸露状态。氢核，即质子，半径相当小（0.03nm），且无内层电子，与电负性较大的 Y 原子产生较强的静电相互作用，从而形成氢键。氢键的强弱与 X、Y 原子的电负性大小有关。电

负性越大，形成的氢键越强。此外，氢键强弱还与 X、Y 原子半径有关，半径越小，越易接近氢核，形成的氢键就越强。X、Y 原子主要是 F、N、O 等原子，其中氟原子电负性最强，半径较小，因而—F—H…F—是最强的氢键。氢键相互作用在分析化学中是一种非常有用的相互作用力。

氢键与氢键的化学位移 hydrogen bond and its chemical shift 化合物分子内或分子间，当含氢的基团周围能形成形式为 X—H…Y 的键合，这里实线为共价键，虚线为氢键。X 和 Y 都是电负性相当大，半径较小的原子，如 F、N、O 等，有时甚至是电负性大的基团。氢键质子化学位移受 X、Y 性质影响很大。强氢键中 X 与 Y 的静电效应是主要的，都使氢周围电子云密度降低，去屏蔽效应增加而化学位移移向低场。在弱氢键的情况下，可能受形成氢键的基团磁各向异性作用的影响更大。如氯仿与苯分子形成很弱的氢键 $Cl_3CH \cdots C_6H_6$。氯仿在苯中的氢处于苯环的屏蔽区，使其化学位移较正常氯仿中氢向高场移动约 0.9。

清洁技术 clean technologies 能保证清洁生产的所有工艺和过程。

清洁生产 clean produce 联合国环境署关于清洁生产的定义是："清洁生产是指将综合预防的环境战略持续应用于生产过程和成品中，以便减少对人类和环境的风险。" 对生产过程，清洁生产意味着节约原材料和能源，取消使用有毒材料，在生产过程中排放废物之前减降废物的数量和毒性；对于成品，清洁生产意味着减降产品从原材料使用到最终处置的整个寿命周期的不利影响。

氰带 cyanogen band 光谱定性分析中，使用碳或石墨电极时，在点弧过程中，碳与空气中的氮结合而产生氰（CN）被激发而发射的带状分子光谱，此光谱带称为氰带。其范围在 358.39～421.60nm 之间，对光谱测定有干扰，因而在 358.39～421.60nm 范围内进行谱线分析时，为了减小氰带的干扰起见，不能用碳或石墨电极或者将试样置于无氮气氛中进行激发，或者在试样中加入低电离电位元素的物质降低弧温，抑制生成较强的氰带。

氰基键合相 cyano-bonded phase 在硅胶基质表面键合上氰烷基作功能层的色谱固定相。如将 γ-氰丙基硅烷或 β-氰乙基硅烷与多孔硅胶反应，即可在硅胶表面结合上一层（单分子层）氰丙基或氰乙基。氰基为氢键接受体，具有中等极性，与硅胶的色谱选择性类似，但比硅胶保留值低。氰基键合相可用作正相色谱和反相色谱的固定相。

球差 spherical aberration 由于电子透镜中心区域和边缘区域对电子会聚能力不同而产生的像差。远轴电子通过透镜时被折射得比傍轴电子要厉害得多，以致两者不能相交在一点上，而在像平面上物点的像变成了一个漫散圆斑。由于球差很难校准，因此对仪器的分辨本领影响最大。

球对称模型计算法 spherical model calculation 也称球对称平均近似。是理论计算电子自旋回波包络线调制（ESEEM）谱的一种方法。对于无规取向体系，若有 N 个等价磁性核分布在未偶电子周围，但不知道具体的构型，则假设 N 个核随机分布在半径为 R 的球面上，这时总的自旋回波调制强度可表示为

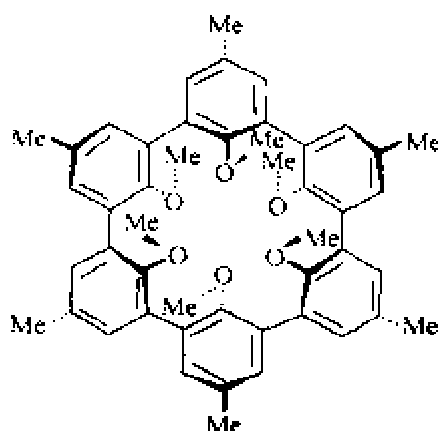
$$\langle E_{mod}(t)\rangle^N = \left(\left(\frac{1}{4\pi}\right)\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} E_{mod}(\theta,t)\sin\theta d\theta\right)^N$$

这里 E_{mod} 是一个核对调制强度的贡献，其具体表达形式根据脉冲序列的不同而不同，是 R、θ 及超精细耦合常数等 ESR 参数的函数。设未偶电子在原点，外磁场在 z 轴方向，θ、φ 与通常的角度定义相同，表示了该磁性核的取向。

球面反射镜 spherical mirror 工作面形状为球面的反射镜，可以是金属制成的，也可以用玻璃磨出球面作基底蒸镀上反射膜制成。球面镜可以使投射到其上的光束会聚或发散，完成光学系统中的聚光、成像或准直作用。凹球面反射镜是最常用的，特殊的场合也用凸球面反射镜，球面反射镜因为球面研磨、抛光最方便，所以价廉，但球面镜像差较大，在成像要求较高时就得采用非球面反射镜。

球偏转能量分析器 spherical deflector analyzer; SDA 静电偏转型能量分析器的一种，是色散型能量分析器。由内外两个同心的球面组成，在球面间加上电压。具有分辨能力强与传输特性好的特点，它在能量分析中得到了广泛的运用，目前的 XPS 谱仪，普遍采用球偏转能量分析器。

球状冠醚 spherand 一类通过醚氧原子配位结合金属离子等客体，使金属盐在有机溶剂中溶解度增加的与冠醚类似的芳香族大环化合物，如图所示。冠醚在结合金属离子形成络合物前其空洞不明显，而球状冠醚具有由氧原子的孤对电子围成的空洞，可以收纳球状单原子离子一类的客体，其空洞非常坚固。下图中所示的球状冠醚对 Li^+ 和 Na^+ 具有特异识别性能。



区分效应 differentiating effect 又称分辨效应。参见**分辨效应**条。

区分性溶剂 differentiating solvent 具区分效应的溶剂。参见**分辨效应**条。

区间估计 interval estimation 根据来自于总体的样本值，在一定置信水平上构造出适当的区间，以表征总体的分布参数或参数的函数的真值所处的范围。所构造出的区间，称为置信区间。如对来自正态总体 $N(\mu,\sigma^2)$ 的一个样本进行测定，测得的平均值为 $\bar{x}$，标准偏差为 S，由此估计总体平均值 μ 所处

的范围$\mu=\bar{x}\pm kS$，式中k是置信系数。

区域扩展 zone spreading 又称区域扩张。它是样品组分在色谱柱内运动时由于各种因素引起谱带变宽的现象。引起区域扩展的因素有涡流扩散、分子扩散、气相传质阻力、液相传质阻力、管壁效应、进样速度过慢或进样量过大等。区域扩展的结果是使峰形变差、柱效降低。参见**涡流扩散**条，**分子扩散**条，**气相传质阻力**条，**液相传质阻力**条，**管壁效应**条。

区域熔融 zone melt-out 基于刚冷凝的固体中杂质浓度分布与熔融态液相中杂质浓度分布不同这种“偏析”现象，利用外加热并使窄的熔融区域连续地按一个方向慢慢沿着棒状样品定向移动，使杂质富集于样品末端或起始端，从而实现杂质分离的方法。这种技术可用于高纯材料的纯化和痕量无机元素的富集。

区组 block 根据区组因素将试验对象加以分组。不同区组之间的条件差异较大，区组内的条件比较一致或相近，这种将被比较的因素水平设置在条件比较一致或相近的区组内进行考察，以减小试验误差能提高试验精度的原则，称为局部控制。局部控制、试验安排随机化和进行重复实验是英国生物统计学家费歇尔（R. A. Fisher）提出的试验设计的三条基本原则。

区组因素 block factor 在试验中其效应会混淆和影响控制因素效应、但又不需要进行考察的只是用来将试验对象分组的因素。如几个人进行协同试验，研究酸度对灵敏度和检出限的影响，分别在不同仪器上进行实验，得到不同的结果，这可能是酸度的效应，也可能是由于不同人使用的不同仪器的性能的影响，两种效应混杂在一起，无法对酸度是否对灵敏度和检出限有影响做出结论。在设计试验时，虽然不考察人和仪器的影响，但在安排试验时仍将其当作一个因素对待，在每一台仪器上，都安排不同酸度试验，以提高试验精度。在这里，仪器即是区组因素，酸度是控制因素。

曲线拟合 curve fitting 研究变量之间的相关关系时，根据一组离散的实验点的分布特点，选择适当函数的连续曲线拟合这一组实验点，以尽可能完善地表示被描述的变量之间的关系。所拟合的曲线在统计上是否有意义，可用相关系数进行统计检验。

曲线平滑 curve smoothing 将不平滑的曲线通过曲线拟合变为平滑的曲线。

趋肤效应 skin effect 指当高频交流电流或交变电磁场通过导体时，由于电磁感应作用引起的高频电流密度或磁通密度在导体截面呈不均匀的分布，越接近导体表面，电流密度或磁通密度越大。即电流或磁通不是集中在导体内部，而是集中在导体表层，从而导致高频电流或电磁场被局限在导体表面而不能进入导体内部的现象。趋肤效应是否显著与导体的横截面尺寸和频率有关。频率越高，趋肤效应越显著。电流或电磁场强度从导体表面随着深度的增加而迅速减小，当电磁场强度减弱到表面

值的 1/e（1/2.718）时，该处的深度称为趋肤厚度（skin depth）。

取代基的加和性 additivity of substituted groups 核外的电子云分布决定了化合物分子中该核的化学位移值的大小。大量的实验事实表明，它主要与核本身的外层电子的组态有关，也取决于其所在基团，以及邻近以化学键相连接的基团、甚至距离较远但空间相关的核等不同密度不同方向电子云影响的综合结果。只要将各种因素简单地加和处理即可较好地推测某核的化学位移。各种取代基在不同化合物分子中都有类似的影响，称这种性质为取代基的加和性。根据此原则，人们总结出许多经验公式能很好地估算或预测某些核的化学位移或谱峰的位置。

取向衬度 orientation contrast 由于单晶样品中存在着镶嵌结构而在X射线形貌图上造成的衬度。当入射的X射线接近于严格单色和平行时，即使相邻的两个亚晶粒（镶嵌块）只有很小的取向差，也不能同时满足布拉格反射条件，因而会在形貌图上形成黑白衬度。取向衬度能非常灵敏地反映出单晶样品中的镶嵌结构。

取向函数 tropism function 红外光谱常用取向函数来表征高分子链的取向程度。取向函数f定义为取向高聚物在拉伸方向完全取向的高分子的百分数。$(1-f)$为完全不取向高分子的百分数。定义红外二向色性比R与取向函数的关系为

$$R=\frac{f\cos^2\alpha+\frac{1}{3}(1-f)}{\frac{1}{2}f\sin^2\alpha+\frac{1}{3}(1-f)}$$

测定高分子样品中不同的结构谱带，如侧链、主链、非晶区、晶区的二向色性比，可了解其结构的取向状态和高聚物在形变时分子结构变化的全貌。测定生物膜或生化反应时生物大分子各官能团的取向函数，从而获得生命过程中各生物物质的功能及生化反应的过程。

取样杯 sampling cup 又称Delves杯，为镍制小杯。取约100μl的试样溶液滴入杯中，在火焰近旁加热干燥后，将其放入原子吸收分光光度计的空气-乙炔火焰内，在火焰加热下蒸发试样，在光路上置有石英吸收管。试样原子化后，从镍杯通过石英管底部的小孔进入吸收管中，因而延长了试样原子在光路上的停留时间，相应地提高了灵敏度。取样杯适于快速测定血中的铅，及其他易挥发的元素。此法灵敏度较取样舟高，但缺点是干扰多，且因镍杯不耐酸，因此当测定酸性样品时，需用碱中和。每个镍杯测定40～50次后需更换。

取样定理 acquisition theorem 任一个正弦函数，在其一个周期内必须至少要采集两个点才能正确描述它而不失真，称为取样定理。通常以等间隔时间来采集自由感应衰减（FID）信号，取一个点的时间，称为取样间隔t_{dw}（dwell time）。频率范围为Δ的信号，取样间隔$t_{dw}\geqslant\frac{1}{2}\Delta$，即取样速

率或采样频率≥2Δ。这个频率称为 Nyquist 频率。

取样间隔 sampling interval 在取样直流极谱、方波极谱和其他类似的方法中，测量或记录电流的时间间隔。

取样深度 sampling depth 表面分析中对样品表面层的分析深度。X 射线光电子能谱的采样深度与光电子的能量和材料的性质有关。一般定义 X 射线光电子能谱的采样深度为光电子非弹性平均自由程的 3 倍。根据非弹性平均自由程的数据可以大致估计各种材料的采样深度，一般对于金属样品为 0.5～2nm，对于无机化合物为 1～3nm，而对于有机物则为 3～10nm。通常取样深度可以通过改变溅射时间和改变掠射角等方式来改变。

取样时间 sampling time 在取样直流极谱、方波极谱和其他类似的方法中，取样间隔的持续时间。

取样舟 sampling boat 用耐高温金属钽制成的试样舟。将试样置于钽舟中，将其靠近空气-乙炔火焰干燥后，再将其置于空气-乙炔火焰燃烧器上方的光路中进行。本法可快速测定某些易挥发的元素，如银、砷、铋、镉、汞、铅、硒、碲等。其缺点是干扰较多。钽舟因取样较多，故其检出限较取样杯好。钽舟能耐酸，但长时间在火焰中使用，会逐渐氧化而改变性能，以致降低灵敏度。因此每个钽舟测定 20～50 次后需更换。

去钝化 depassivation 处于钝化状态的金属由于表面上钝化膜的除去或破坏，使钝态金属活化，引起腐蚀速度的增加过程。

去极化电极 depolarized electrode 电极的面积很大，电解时电流密度很小，不易出现浓差极化，电极电位是恒定的电极。

去极剂 depolarizer 能在电极上发生氧化反应或还原反应，使电极电势维持在其平衡值附近的物质。发生阴极反应的物质叫阴极去极剂，发生阳极反应的物质叫阳极去极剂。

去离子水 deionized water 用离子交换分离等技术去除了离子性物质的纯水。离子色谱中配制流动相和样品都要用去离子水，以避免水中所含离子性成分干扰被测离子的分离与检测。

去耦方式 decoupling mode 去耦的核可以是观测核的同（种）核，也可以是异（种）核，因此可分为同核去耦和异核去耦。依去耦辐射场的强度、频偏、控制方式等又可分为宽带去耦、偏共振去耦、选择性去耦、门控去耦、反（转）门控去耦、脉冲同核去耦等方式，不同去耦方式有着不同效应。许多情况下，去耦是将自旋耦合出现的多重线合并为单线，不仅简化了图谱，而且大大增加谱线的强度。有时可“改变”耦合常数，从谱图中找出耦合峰间的关系，确定耦合常数的相对符号，产生核的欧沃豪斯（NOE）效应，从而确定分子结构。

去溶 desolvation 又称脱溶。由

雾化形成的湿气溶胶脱去自身溶剂变成干气溶胶的过程。在火焰原子吸收光谱分析中，使用预混合型雾化器时，去溶效果依赖于气溶胶的粒度、溶剂的性质、火焰温度与火焰气流速度等因素。去溶过程分为两个阶段，先在预混合室和传输过程中部分去溶，而后进入火焰，细小的气溶胶通过火焰下部的焰心区受热作用将达到完全脱溶，再在内焰区解离和原子化；粒度大的气溶胶仍不能完全去溶，只是消耗热量，而不能对原子吸收信号作出贡献。

去溶剂系统 solvent removal system 在ICP等离子体中，试样喷成细雾后，可采用去溶剂方式将气溶胶引入等离子炬。去溶装置包括加热管及冷凝管，在加热管中（200～300℃）将雾滴的溶剂蒸发为气体，在冷凝管中溶剂蒸气凝结并流出管外，因此喷入等离子炬的气溶胶所含溶剂（水分）大大减少。

去溶作用 solvent removal effect 采用去溶装置除去试样气溶胶中的溶剂，以大大减少喷入等离子炬的气溶胶中溶剂（水分）含量。不加去溶装置时，湿的气溶胶（分散相为液滴、分散介质为气体）直接引入等离子体，会使焰炬温度降低，分子解离不完全，OH分子带增强，背景加深。又因气溶胶中液滴碰撞凝聚回流，真正进入焰炬的待测元素量减少，即雾化效率较低，导致检出限变差。

去尾剂 tailing reducer 又称减尾剂。是涂渍于吸附剂表面以消除色谱峰拖尾的，具有高沸点的有机物（如气-液色谱中所用的固定液）或无机物（如 NaOH、NaCl、Na_2SO_4）。在气相色谱中，尤其是在气-固色谱分析中，由于所用固体吸附剂表面的不均匀性，造成分离组分的色谱峰严重拖尾，降低了分离效能。去尾剂的作用是覆盖吸附剂表面的某些活性中心，使吸附性能减弱并趋于均匀，达到改善峰形的目的。

全程序质量控制 all program control of quality 对环境监测的全部程序进行质量控制，包括内部质量控制和外部质量控制。内部质量控制是指分析者或分析实验室对监测结果的自我校核；外部质量控制则由属于常规监测外的有经验的人员采用如分发标准物质进行考核，以判断数据的可靠性，对监测质量进行独立评价。

全氮分析 total nitrogen analysis 土壤中氮素的形态可分为无机态和有机态两类，其中能被植物直接吸收利用的无机态仅占全氮量的5%左右，而绝大部分以有机形态存在。土壤中氮素的总贮量及其存在状态，与作物的产量在某种条件下有一定的正相关关系。了解土壤全氮的含量，可以判断土壤肥力，据此制订施肥增产措施。最常用的土壤全氮的测定方法是凯氏定氮法，此外还有重铬酸钾-硫酸消化法、高氯酸-硫酸消化法、硒粉-硫酸铜-硫酸消化法、扩散吸收法等。

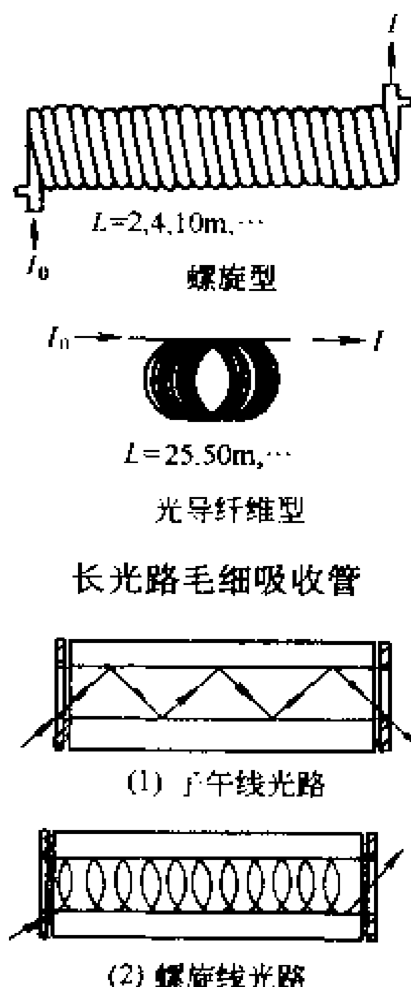
全多孔硅胶 macro-reticular silica

gel　表面布满大而深的孔隙的硅胶微粒。孔隙深度通常在 10～100nm。其特点是比表面积大，通常在 200～$500m^2 \cdot g^{-1}$。但传质阻力较大，柱效较低。因其制备工艺简单、成本低，在制备色谱中仍广泛使用。

全多孔型填料　macro-reticular packing material　又称大孔填料，指基质颗粒上除分布有小孔（如孔径小于 5nm）外，还有大孔（如孔径大于 5nm，甚至达数十 nm）的填料。常见全多孔填料有硅胶、氧化铝、多孔玻璃、多孔碳、有机多孔聚合物等。大孔的存在使溶质分子在填料粒子内的扩散速度加快。

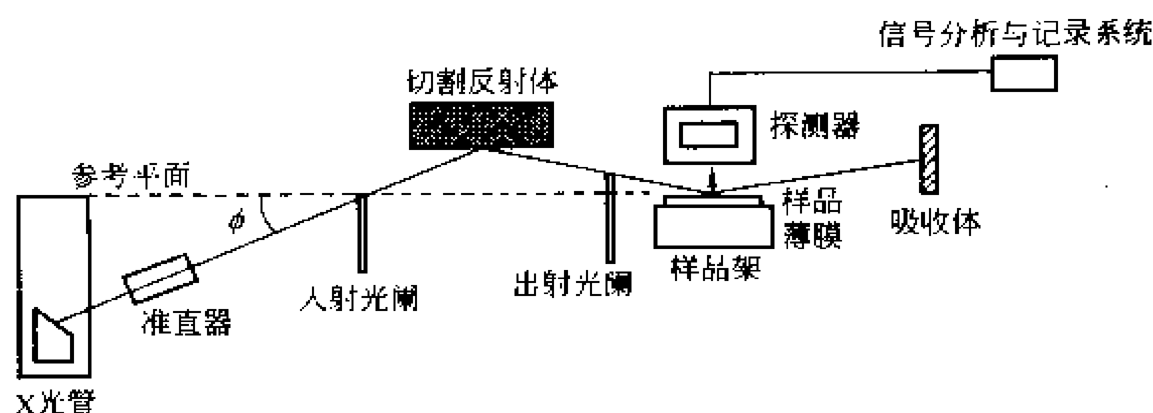
全二维色谱　comprehensive two-dimensional gas chromatography；C_2D-GC　将分离机理不同、而又相互独立的两根色谱柱构成二维色谱。在气相色谱中往往是采用一根按沸点分离的色谱柱和一根按极性分离的色谱柱，经第一根柱分离后再经过一个冷凝再蒸发的机构使前一支柱分离出来的组分全部进入第二根柱进行第二次分离，组分从第二根柱流出进入检测器，经计算机处理，以 1 柱的保留时间为纵坐标，2 柱的保留时间为横坐标，得到平面二维色谱图。最大峰容量是两根柱峰容量的乘积，分离效能和速度都得到很大的提高。

全反射长光路毛细管分光光度法　complete reflection long-pass spectrophotometry　通过加长吸收光程来提高光度分析灵敏度的一种新的光度分析技术。该法可使用长至数十米的毛细管吸收池（long capillary cell，简称为 LCC，如内径为 250μm，长 25m 或 50m 的硅树脂涂覆的光导纤维管），可以高灵敏度地测定溶液极其微弱的吸收，从而极大地提高了分析的灵敏度。例如，用 50m 的毛细管液芯光纤系统，可使 Hg、I、Cu、P 等元素的测量灵敏度达 $2 \times 10^{-14} g \cdot g^{-1}$。只有溶剂的折射率大于 LCC 材料的折射率时，才能在 LCC 中实现光的全反射。参见下图。



长光路毛细吸收管中的反射光路

全反射 X 射线荧光分析　total reflection X-ray fluorescence analysis；TXRF　一束经过准直的初级 X 射线



全反射 X 射线荧光分析装置示意图

束以低于或接近于全反射临界角投射到反射体时，产生全反射后再投射到样品，激发样品中被分析元素产生特征 X 射线荧光，被垂直放置的 Si (Li) 探测器所检测，实现痕量元素的定性和定量分析。1971 年由 Y. Yoneda 和 T. Horiuchi 首先提出。本方法的特点是：（1）检出限低，对原子序数大于 11 的大部分元素检出限可达到 $10^{-10} \sim 10^{-12}$g，表面分析的检出限可达每平方厘米 $10^{9} \sim 10^{11}$原子；（2）制样简单，定量方便；（3）试样用量少，为微升或微克级；（4）基体效应可以忽略；(5) 应用范围广，可测定周期表中原子序数大于 11（Na）到 92（U）的所有元素，线性范围达 3～4 的数量级，具有多元素同时测定的能力，且可进行表面分析和近表面深度的逐层分析。缺点是仪器价格贵。本法应用全反射原理有效地降低了 X 射线的本底，是表面超痕量杂质分析的有效方法，它在环境科学、海洋科学、生物科学、超导材料等领域中都有很好的应用前景。

全分析 bulk analysis 通常是指对矿物原料多种组分的分析。指为达到某种使用要求，对材料样品中多种元素或多种组分的测定。实际操作中，多为材料中一部分元素或组成的分析，而非全部组分的分析。

全硅烷化去活 complete silylanization deactivation 一种用硅氮烷去活剂如六甲基二硅氮烷（HMDS）对玻璃毛细管柱进行去活的方法。全硅烷化去活的方法既有去活的作用，又有改进固定液湿润性的作用，是一种广泛使用的毛细管制作技术。全硅烷化去活试剂主要有硅氮烷类，烷氧烷类，含氢聚硅氧烷类，具体操作条件取决于所用色谱柱的材料和固定相种类。

全角矩阵最小二乘修正 full matrix least-squares refinement 晶体结构测定中，一种优化结构模型的最小二乘计算方法。此法假定每个晶体结构参数（如原子的坐标参数和热振动参数等）的变动对其他结构参数的影响不能忽略，必须对所有结构参

数同时进行优化。与对角矩阵最小二乘法和块矩阵最小二乘法相比，其缺点是要占用大量的计算机内、外存空间和计算时间；优点是能得到精确的晶体结构。所以，只要计算机能满足要求，在最终的结构精修阶段都会采用这种优化计算方法。

全能量法 total energy method 在测定谱线的绝对强度时，要求在严格的工作条件下把一定量的试样烧完，而且要把所发射的谱线强度全部记录下来，才能得到比较精确的分析结果。这种把试样全部烧完的全曝光方法称为全燃烧法或全能量法。全能量法的优点在于不必花费很多时间选择内标元素。但是，全能量法的缺点是无法消除由工作条件变化和试样成分变化所引进的误差。因此，全能量法的全部操作必须十分严格，弧烧条件必须尽量稳定，才能减小分析结果的误差。如果全能量法结合选用内标，可以获得较为满意的分析结果。

全谱直读 total spectrum direct reading 它是指可一次测量可读出波段光谱的直读光谱仪。如 Varian 公司的 Vistar CCD、Thermo Solution 公司的 IRIS 系列和 PE 公司的 Optima 3000 为分段式直读光谱仪。PE 公司的 Optima 3000 结构如下：全谱直读等离子体发射光谱仪的光源发出的光通过两个曲面反光镜聚焦于入射狭缝，入射光经抛物面准直镜反射成平行光，照射到中阶梯光栅上使光在 *X* 方向上色散，再经另一个光栅（Schmidt 光栅）在 *Y* 方向上进行二次色散，使光谱分析线全部色散在一个平面上，并经反射镜反射进入面阵型 CCD 检测器检测。由于该 CCD 是一个紫外型检测器，对可见区的光谱不敏感，因此，在 Schmidt 光栅的中央开一个孔洞，部分光线穿过孔洞后经棱镜进行 *Y* 方向二次色散，然后经反射镜反射进入另一个 CCD 检测器对可见区的光谱（400～780nm）进行检测。

全球环境监测 global environment monitoring 全球环境监测项目包括以下 4 大类内容：（1）生态监测——全球土壤和植被监测、水资源监测、生物圈监测、海洋生物资源监测；（2）污染物监测——有关卫生的监测、有关气候的观测、海洋监测；（3）自然灾害监测；（4）环境监测的研究。中国从 1978 年开始先后参加水质监测、大气污染监测、食品和动物饲料污染检验、生物学监测等规划。

全球环境监测系统 global environment monitoring system; GEMS 是联合国环境规划署下属的全球和地区环境检测的协调中心，简称 GEMS。它系统地收集、分析和评价各种环境状况变化因素的数据和环境在时间和空间上所曾经历的变化情况，但不直接承担具体的监测工作，而是负责协调国际上有关的活动。它向环境基金提出建议，通过资金的分配促进监测活动。监测系统支持的活动主要有 5 个方面：有关气候的观测；污染物远程迁移的监测；有关人体健康的监测；

陆地可更新资源的监测；海洋污染状况的监测。我国从1978年开始参加其监测工作。

全去耦 complete decoupling 常指异核去耦。见**宽带去耦**条。

全热解石墨管 completely pyrolytical graphite tube 是热解涂层石墨管的一种，由全热解石墨制成的石墨管。特点是致密不透气，导热性良好，抗氧化性强，升华温度高，良好的抗化学腐蚀性能、使用寿命长、能减少记忆效应和改善检出限。

全息光栅 holographic grating 用机械刻划方法制造的光栅（刻划光栅）工艺难度大、费时费工，因而很昂贵，而且限于机械、工艺条件很难刻划出更高线槽密度（每毫米2400线以上）、更大尺寸（100mm×100mm以上）的刻划光栅。利用光学干涉技术和全息照相手段，将高单色性激光产生的干涉条纹形成在光致抗蚀剂上，经过显影、定影、复制等过程，也可制造出衍射光栅，称之为全息光栅。全息光栅不但制造时完全避开机械工艺难关，理论上可以制造任意大尺寸（已有1m×1m）、任意高密度的光栅，也可在任意曲面上制造非球面凹面光栅，而且全息光栅相对于刻划光栅还有杂散光强度极低、没有由周期机械误差造成的鬼线、生产成本和售价低等关键优点，所以是现代光谱仪器普遍采用的色散元件。近年来，也有弯曲、不等距栅线的消像差凹面全息光栅商品。全息光栅最大的缺点是其栅线微观形状难以达到规则的直边锯齿形，因而全息光栅的闪耀性和集光效率不如刻划光栅。

全相关系数 total correlation coefficient 又称总相关系数和复相关系数。表示多元回归分析中因变量 y 与自变量 x_1，x_2，…，x_n 整体之间相关程度的参数。它不能确切表征 y 与每个自变量的相关程度。表征 y 与每个自变量的相关程度需用偏相关系数。

全消耗型燃烧器 total consumption burner 燃气和助燃气分别由不同的喷嘴喷出，不经过预混合室直接在燃烧器喷嘴出口上方边混合边燃烧的一种燃烧器。分析样品时，试液由助燃气直接全部喷入火焰。它产生的火焰受到强烈的扰动，是一种紊流火焰，稳定性差，背景噪声高，吸收光程短，喷入火焰的试液形成的雾珠和气溶胶粒度分布范围宽，只有很小部分细粒度气溶胶能有效地原子化，大量的大粒度的雾珠通过火焰并不能原子化，对火焰有强烈的冷却效应。目前在火焰光度计中尚使用这种燃烧器。

全血黏度测定 blood viscosity determination 实际上是全血比黏度（η_b）。用毛细血管黏度计测定时，同体积的全血经过有一定长度和内径的毛细玻璃管所需时间（t_b）与同体积生理盐水所需时间（t_w）的比值。增高表示血液黏度增加或呈高凝状态。

全自动比色分析器 completely automatic colorimetric analyzer 在有色金属、稀有金属和铀钍等放射性元素的湿法冶金中，需要控制工艺流程

中浸出液，萃取原液、淋洗液以及废弃液中的微量元素。在现场用全自动比色分析器及时地对样品进行分析，对控制工艺过程和提高金属的提取效率有十分重要的意义。用于湿法冶金的全自动化比色分析器主要形式有三种，即间歇式程序分析器、连续流动分析器（即比例泵型自动分析器）和流动注射自动分析器。

权函数处理 weighted function treatment 又称为窗函数处理。经傅里叶变换前，对整个时域自由感应衰减（FID）信号分段进行不同权重的处理。可对它作一种或几种数学处理，如乘以某种函数、移去某些点、添加某些点，目的是提高信噪比、改善分辨率、基线平滑，或去掉某些杂质峰和畸变峰等。窗函数可根据实验者的需要设计。

权威方法 definitive methods 在用于测量有关量值的所有方法中，已经消除了系统误差或将系统误差控制在相对于随机误差可以忽略不计的水平、准确度最高的测量方法。可直接用权威方法进行高准确度的测量，对标准物质定值和评价其他方法的准确度。

权重系数法 method of weight coefficient 在确定的工作条件下，某元素的某一根谱线的权重系数为一常数。通过事先对标样的试验，可以确定各个待测元素的分析线的权重系数。在分析试样时，不必再摄标样光谱，只需测出试样光谱中各元素分析线的相对强度，就可利用事先已经确定的权重系数计算出各元素的相对含量，这种方法称为权重系数法。这个方法虽对试样和标样的类型和形状不要求一致，但样品的化学成分和物理结构对谱线强度的影响仍然是不可避免的。同时，这个方法要求严格控制工作条件，否则也会引入较大的误差。此外，在激光微波等离子体中，全部元素是相互有关的，因而权重系数法不便于测定试样中单个元素的含量，只有对试样进行全分析才能提供有意义的结果。假如没有对试样中全部元素进行测定，那么分析结果的误差就会增大。

缺级 order absence 光栅光谱的形成是单缝衍射和多缝干涉的联合作用结果，多缝干涉形成的明锐的各干涉条纹就是各波长的谱线，但这些谱线的强度峰值还要受到单缝衍射花样的调制。在单缝衍射花样强度为零的某些特殊点，即使干涉条纹仍有一定的强度也会被调制为零，这条谱线将不可能出现，这种现象称为光栅缺级，在光谱学研究和分析工作中会产生影响。

R

燃料电池 fuel cell 一种可以连续工作，能使燃料与氧化剂起化学反应时的化学能直接转变为电能的装置。燃料电池的特点是：（1）正极、负极均由微孔惰性材料（如镍、碳、铁、氧化铁等）制成，电解质可用酸、碱溶液、熔融的碳酸盐或金属氧化物；（2）电极的反应物质（提供化学能的燃料和氧化剂）储存在电池的外部，可以根据需要连续加入，产物随时排出，电极本身在工作时不消耗、无变化；（3）它是一种恒温的能量转换装置，不受热力学卡诺循环的限制，能量利用率可以高达80%以上。燃料电池可供发电、宇航、环保以至人工心脏的动能之用。

燃烧鉴别试验 combustion test 一种简单鉴别塑料的试验方法，是将塑料靠近火焰，从其有无软化、火焰的形状、火焰的颜色、燃烧的难易、有无自熄性、气味、石蕊试纸反应等来判别其属类。

燃烧器 burner 供可燃混合气燃烧产生化学火焰的装置。广泛使用的是预混合型燃烧器，它由雾化器（常用的是同心雾化器）、预混合室和缝型燃烧器及相应的气路系统组成。雾化器是预混合型原子化器中的关键部件，其作用是将试样雾化成直径为微米级的气溶胶。对雾化器的基本要求是喷雾稳定，雾化效率高，形成的气溶胶粒子的粒径细，且粒径分布范围窄。预混合室使粒度大的气溶胶凝聚为更大的液珠沿室壁流入泄液管排走，使进入火焰的气溶胶的粒度更均匀，同时使燃气、助燃气和气溶胶在室内充分混匀，以减少其进入火焰时引起扰动。缝型燃烧器产生层型火焰，使进入火焰的气溶胶脱溶、蒸发和原子化。层型火焰受到的扰动小，火焰稳定，噪声小，使用安全。还有一种全消耗型燃烧器，燃气和助燃气不经过预混合室，直接在燃烧器喷嘴出口上方边混合边燃烧，产生的火焰受到强烈的扰动，稳定性差。它在原子吸收光谱分析中几乎已完全被淘汰，但尚在火焰光度计中使用。

燃烧曲线 combustion curve 又称蒸发曲线、弧烧曲线。当试样在电弧中燃烧时，表示其组分元素所发射的谱线强度（或黑度）随时间而变化的曲线称为燃烧曲线。该曲线常用动板实验方法而做出。当以粉末电弧法作光谱定量分析时，需根据燃烧曲线来选择预燃时间及曝光时间。

染料激光器 dye laser 以有机染料作为激活介质的一类可调谐激光器，其输出激光可以在很宽的波段范围内连续平稳地调谐，常用作一些特殊的拉曼光谱（如共振拉曼光谱）的研究。影响染料激光器输出波长的因素主要有染料的品种、染料溶液的浓度、溶剂种类、温度及激活区长度等。常用的染料有罗丹明 B、罗丹明 6G 和荧光素钠等。

染料结合法 dye binding method 一种快速测定蛋白质含量的方法。在特定的条件下，蛋白质可与某些染料（如胺黑 10B、酸性橙 12 或橙黄 G 等）定量结合生成沉淀，用分光光度计测定沉淀反应完成后剩余的染料量，可计算出反应消耗的染料量，进而可求得样品中蛋白质含量。

染色牢度 colour fastness 印染纺织品的色泽耐受外界影响的坚牢程度，是纺织品重要质量指标。根据不同外界条件可分为耐日晒色牢度、耐气候色牢度、耐洗色牢度、耐磨擦色牢度、耐汗渍色牢度、耐唾液色牢度、精元耐还原色牢度、耐熨烫色牢度、耐水浸色牢度、耐刷洗色牢度、耐升华色牢度、耐干洗色牢度、耐海水色牢度。染色牢度以试验后的褪色、黏色程度评定等级表示；耐日晒色牢度、耐气候色牢度按八级制评定；其他色牢度按五级制评定，级数越高表示染色牢度越好。

染色体 chromosome 是一条很长的双股螺旋 DNA 分子和蛋白质装配而成的基因组独立单位。其中包括部分或全部的遗传信息。人体细胞共含有 22 对常染色体和 X、Y 两条性染色体，每条染色体平均含 1.05 × 108bp，含约 3000 个基因。在动植物细胞有丝分裂或减数分裂时，染色体凝聚为显微镜下可见的线状结构。对于任何物种，细胞中成对的同源染色体在所有方面都相同。除蛋白质和 DNA 外，染色体还含有少量 RNA。组成染色体的蛋白质，根据其氨基酸特点分为组蛋白和非组蛋白两类。组蛋白携带大量电荷，故极性很强，是维持染色体结构的主要化学力之一，同时，它对染色体中 DNA 的包装具有重要作用。非组蛋白则对维持染色体的高级空间结构和调控基因表达具有重要作用。

染色质 chromatin 是一种处于间期的细胞核中存在的 DNA 和蛋白质的复合物。基本单元是以组蛋白八聚体为核心，DNA 盘绕其外两周而成的核小体结构。染色质含 $\frac{1}{3}$ DNA，$\frac{1}{3}$组蛋白和$\frac{1}{3}$酸性蛋白。染色体可分为常染色质和异染色质。染色质经压缩、盘折和重叠形成非常紧密的染色体结构。

扰流器 flow spoiler 装置在雾化室内用来使气溶胶粒径进一步细化的部件。它由许多成一定角度的叶片组成。由喷雾器出来的雾珠和气溶胶受到扰流器的阻挡，使大粒径的进一步细化，得到更多的小粒径的气溶胶，同时使可燃气体和气溶胶充分混合。由于扰流器除去了大部分粒径大的雾珠，送至燃烧器的可燃气已混合均匀，使火焰燃烧更加稳定，也减小了火焰噪声。

热变宽 thermal broadening 有原子的无规热运动引起的变宽。参见多普勒变宽条。

热变性 thermal denaturation 分子受热作用后失去原有的构象的现象。蛋白质和核酸都可发生热变性作

用，但核酸在热变性后缓慢冷却仍可复性，恢复原来构象和性质，这是核酸分子杂交的分子基础。

热场流分级 thermal field flow fraction; TFFF 在一个外温度梯度场和载流的流型共同作用下完成对不同组分的分离的。例如在柱槽的上一块板加上热源，而下一块板与冷源相连，两块板之间建立一个温度梯度。当溶剂在其间流动时，溶质分子由于热扩散现象而被压至较冷的一边。热场流分级广泛应用于各种合成高分子或微粒物质的分离。与排除色谱相比，热场流分级峰容量大，分级能力强［分级能力用 $1/\theta$ 表示，$1/\theta = M/\Delta M$。这里 M 为两个级分的平均分子量，ΔM 是能够完全分离（$R_s \geq 1$）的两个级分之间分子量的差别的最小值］。因此是较理想的分离方法。参见场流分级条。

热传声法 thermoacoustimetry 在程序控制温度下，测量通过物质后的声波特性与温度的关系的一种技术。该法通常采用某一恒定频率的声音脉冲通过试样，检测其传播速度和振幅的变化。这种测量方法可推断聚合物的黏弹特性和取向。此法除了可得到材料的黏弹特性，还可对纤维进行区分，例如人造丝和棉纤的热传声曲线有着明显的差别。

热磁学法 thermomagnetometry 在程序控制温度下，测量物质的磁化率与温度关系的一种技术。该法主要是利用物质的磁性或顺磁性进行研究，例如利用强磁性体和未成对电子的自旋研究金属原子的氧化状态，又如铬酸锌、铬酸铜等催化剂在加热过程中通常会发生分解反应而产生复杂的中间体。因此检测这些顺磁性中间体的逐渐形成和衰减过程对研究这些催化剂的热分解和机理是很重要的。

热导检测器 thermal conductivity detector; TCD 又称热导池检测器，也称卡他计（Katharomater）。热导检测器是依据各种化合物都具有不同的热导率，利用热敏元件（钨丝或铂丝、铼钨丝等）组成的平衡电桥测量热导率发生变化的仪器装置。纯载气通过电桥中的一臂（参考臂），混有被分离组分的载气通过电桥中的另一臂（测量臂），由于两臂热导率的差别，其电阻值发生变化，电桥产生不平衡电位，以电压的信号输出得到该组分的色谱峰。热导检测器的灵敏度取决于载气和被测物质热导率的差值，差值越大，灵敏度越高，当被测物质的热导率大于载气时，则产生反峰。热导检测器的灵敏度最高可达 10^{-6} 数量级，线性范围约为 10^5。

热电学法 thermoelectrometry 在程序控制温度下，测量物质的电学特性与温度关系的一种技术。该法测量介电常数和介电损耗与温度的关系，可有助于解释传导机理、分子取向、极化和松弛等。除上述测量外，测定物质的电流-温度曲线，可用于检测物质及其热分解产物的导电性。例如，该法对 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ 的测定，在电流-温度曲线上 100℃ 处有一个峰，说明此时有液体水存在，以致通

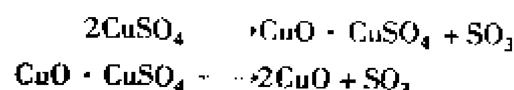
过试样的电流增大，随着水分的蒸发，电流又逐渐下降。因此该法可作为其他热分析方法的补充手段。

热电子发射枪 thermal emission electron gun 是指通过加热灯丝产生热电子，再利用对其加高偏压进行加速的方法使热电子从灯丝表面发射出电子束的一种装置。其基本参数有灯丝电流、偏转电压以及发射电流。

热发射电子源 thermal emission electron source 是指利用热发射的原理发射电子的装置，如钨丝、六硼化镧灯丝等。

热发声法 thermosonimetry 在程序控制温度下，测量物质的声发射与温度关系的一种技术。它主要测量由晶体结构中组分位移产生的噪声讯号，这种位移可由试样的机械断裂、夹杂物的喷出、相态的转变和塑性变形等引起。例如，利用热发声法可简便地检测出α-方英石转变成β-方英石的相转变过程，因为这种相转变过程伴有大约4%的体积膨胀而发出噪声讯号。

热反射光法 thermoreflectometry 在程序控制温度下，测定反射光强度与温度关系的一种技术。该法可通过立体显微镜同时观察试样的形貌和颜色的变化。热反射光法也可应用于固态分解反应机理的研究，例如 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ 在脱水反应之后的分解机理，经研究表明按下列反应方程式进行



$$2CuSO_4 \longrightarrow CuO \cdot CuSO_4 + SO_3$$
$$CuO \cdot CuSO_4 \longrightarrow 2CuO + SO_3$$

当温度高于690℃时无水 $CuSO_4$ 开始分解，呈浅黄色，并且可看到先转变成金黄色的碱式硫酸铜，最后成为黑色的CuO，这些变化都伴有反射光强度的减弱。

热反射光谱法 thermal reflectance spectroscopy 在程序控制温度下，测量物质对特定波长光的反射率与温度关系的一种技术。该法可用于研究温度对晶体结构转变的影响。例如，用625nm波长的光照射双氯化（氮杂苯）钴（Ⅱ）络合物从八面体结构转变成四面体结构时，发现升温速率对其反射率影响较大，随着升温速率的增大其反射率下降。

热分级谱法 thermal step chromatography 该法是通入气体（通常为氮气）把试样的挥发性产物收集到薄层板上，薄层板可左右横向移动，因此随试样等速升温，在薄层板的横向便可收集到相应于各个温度的挥发性产物。此后，用溶剂在上下方向展开，即可得到薄层色谱图。

热分析 thermal analysis 在程序控制温度下，测量物质的物理性质与温度关系的一种技术。在加热或冷却的过程中，随着物质的结构、相态和化学性质的变化都会伴有相应的物理性质的变化，这些物理性质包括质量、温度、尺寸和声、光、热、力、电、磁等性质。由此可见，热分析方法的种类是多种多样的，根据国际热分析协会的归纳和分类，目前热分析方法共分为9类17种，例如热重法、差热分析、差示扫描量热法、热机械

分析、动态热机械法、逸出气分析、放射热分析、热微粒分析、热光学法、热发声法、热电学法、热磁学法等。

热分析的指纹特征谱图 fingerprint figures of thermoanalysis 复杂的无机和有机化合物通常具有比较复杂的差热分析曲线，虽然不能对差热分析曲线上所有的热效应作出解释，但是它们像指纹一样表征着物质的特征，因此可通过与已知化合物的差热分析曲线进行对比的方法来鉴别物质。

热分析联用技术 simultaneous techniques of thermal analysis 在程序控制温度下，对试样采用两种或多种热分析技术。热分析联用技术有下列三种方式：（1）同时联用技术，在程序控制温度下，对一个试样同时采用两种或多种分析技术，例如热重法和差热分析的联用；（2）串接联用技术，在程序控制温度下，对一个试样同时采用两种或多种分析技术，第二种分析仪器通过接口与第一种分析仪器相串联，例如热重分析和质谱的联用；（3）间歇联用技术，在程序控制温度下，对一个试样采用两种或多种分析技术，仪器的联接形式与串接联用相同，但第二种分析技术是不连续地从第一种分析仪器取样，例如差热分析和气相色谱的联用。

热分析与气相色谱联用 simultaneous thermal analysis and gas chromatography 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热分析（如热重法、差热分析和差示扫描量热法）和气相色谱分析的一种技术。由于热分析是一种连续的测定过程，而气相色谱从进样到出峰需要一定的时间间隔，所以在热分析仪与气相色谱仪之间串接的接口必须每隔一定时间间隔通过载气把热分析仪中所分解的气体产物输入气相色谱柱进行分析。这种联用技术既可得到热分析曲线又可分析相应的分解产物，对研究热分解反应机理极为有用。例如差热分析和气相色谱联用分析聚苯乙烯，表明其热降解产物主要是苯乙烯单体。由于气相色谱的峰面积与逸出气体量成正比关系，因此可利用苯乙烯单体的峰面积来求算聚苯乙烯解聚作用的动力学参数。

热分析与质谱联用 simultaneous thermal analysis and mass spectrometry 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热分析（如热重法、差热分析和差示扫描量热法）和质谱分析的一种技术。近年来，该联用方式有热重法-质谱（TG-MS）、热重法-差热分析-质谱（TG-DTA-MS）和热重法-差示扫描量热法-质谱（TG-DSC-MS）等。这些联用技术对剖析物质的组成、结构以及研究热分解机理是极为有用的。

热辐射 thermal radiation 与温度有关的辐射现象。由于物质的粒子（包括原子、分子和离子等）受热激发而引起的辐射能的发射过程。其能量传递过程是借助电磁波方式进行的，它具有连续的辐射能谱，波长自

远红外区延伸到紫外区，但主要靠波长较长的红外线。

热光度法 thermophotometry 在程序控制温度下，测定试样的透光强度与温度的关系的一种技术。该法特点是可获得有关材料燃烧特性的资料，迅速而又简便。例如利用热光度法可检测高聚物的着火温度和着火时所产生的烟雾强度。

热光学法 thermophotometry 在程序控制温度下，测定物质的光学特性与温度的关系的一种技术。由于物质的光学特性包括透射、反射、双折射和发光等，所以热光学法的种类较多，如热反射光法和热发光法等。这些热光学法可应用于研究物质的相变过程和热分解机理。近年来，热光学法作为热重法和差热分析的补充技术而受到重视。

热机械分析 thermomechanical analysis; TMA 在程序控制温度下，测量物质在非振动负荷下的变形与温度的关系的一种技术。测定时对具有一定形状的试样施加外力，根据所测试样的变形温度曲线，可求算出试样的力学性质。所施加的外力的方式有压缩、扭转和拉伸等。该法可测定材料的收缩应力、弹性模量、拉伸和压缩模量、膨胀系数、玻璃化转变温度以及用于蠕变的研究等。

热激发 thermal excitation 在通常情况下，原子处于能量最低的基态。基态原子吸收热能而跃迁到较高的能级状态的过程称为热激发。

热解光谱 pyrolyzate spectra 样品经加热裂解后，测定由裂解产生的气体凝结液及低分子量聚合物甚至单体所获得的光谱。它适用于那些含有大量填料而又不溶的高聚物，如环氧树脂、硫化橡胶、交联聚苯乙烯、纤维等一类物质的鉴定。

热解气相色谱 thermolysis gas chromatography 将聚合物在热解器中加热分解为若干易挥发的小分子物质，然后将此热解产物进行气相色谱分析。由于各种物质的热解色谱图具有各自的特征性，因此可利用热解色谱图中能反映物质结构、组成的特征碎片来定性和定量地分析混合物中的各个组分。

热解涂层石墨管 pyrolytically coated graphite tube 在10% CH_4 和90% Ar 的混合气流中用高温热解甲烷的方法在普通石墨管表面涂敷了一层致密的热解石墨的一种特殊的石墨管。此种石墨管的特点是致密不透气、导热性良好，抗氧化性强，升华温度高达3700℃，使用寿命长，能减少记忆效应和改善检出限。

热离子检测器 thermionic detector 见碱火焰电离检测器条和氮-磷检测器条。

热力学分配平衡常数 equilibrium constant of thermodynamic distribution Nernst 根据热力学理论指出，在恒温恒压下，当溶质 A 在两相间达成平衡时，其化学势必相等，$\mu_1=\mu_2$。而 A 在每一相中的化学势与其活度 a 有如下关系

$$\mu_1 = \mu_1^{\ominus} + RT\ln a_1$$

$$\mu_2 = \mu_2^{\ominus} + RT\ln a_2$$

式中，$\mu_1^{\ominus}$ 和 $\mu_2^{\ominus}$ 分别为溶质在第一和第二溶剂中的溶液的标准化学势。将上面三式合并得，$\mu_1^{\ominus} + RT\ln a_1 = \mu_2^{\ominus} + RT\ln a_2$，［所以］$\Lambda^{\ominus} = \frac{a_2}{a_1} = e^{\frac{-(\mu_2^{\ominus} - \mu_1^{\ominus})}{RT}} = \frac{A_2\gamma_2}{A_1\gamma_1} = \frac{\Lambda\gamma_2}{\gamma_1}$，式中，$\Lambda^{\ominus}$ 称为 Nernst 热力学分配平衡常数。

热流型差示扫描量热法 heat-flux differential scanning calorimetry 利用铜盘把热量传输到试样和参比物，且铜盘还作为测量温度的热电偶结点的一部分。传输到试样和参比物的热流差通过试样和参比物平台下的镍铬板与铜盘的结点所构成的镍铬-铜热电偶进行检测，试样温度由镍铬板下方的镍铬-镍铝热电偶直接测量。该法能定量地测定各种热力学参数（如热焓、熵和比热等）和动力学参数，所以在应用科学和理论研究中获得广泛的应用。

热喷雾电离 thermospray ionization；TSI；TSPI 质谱分析中，将含少量电解质的样品溶液经金属毛细管进入低真空区，毛细管被加热时，样品在毛细管出口体积急剧膨胀，形成喷雾，称为热喷雾，在热喷雾过程中能实现离子化。为了提高离子化效率，在喷雾后常常再通过放电电离或其他电离手段促进离子化。

热喷雾接口 thermospray interface 是液相色谱-质谱联用仪的一种将接口和电离结合在一起的技术。主要由毛细管进样针、毛细管加热装置、抽气系统组成。液相色谱流出物经过金属毛细管时被剧烈加热，溶剂急剧膨胀，从喷口快速喷出，形成细微雾滴，由于溶液中存在电解质，因此微小雾滴也带有电荷。带电雾滴蒸发变小，导致表面电荷密度增大，局部电场增强，当达到一个临界值时，溶质以离子或离子聚合体的形式从液滴中解脱出来，进入质谱仪进行分析。为了能形成足够多的离子，在喷口的下游加一灯丝或放电针，必要时开启灯丝或放电针，使产生化学电离或放电电离。此种接口在液相色谱流动相含水量高的情况下使用效果较好，且要求在热喷雾中含有高浓度挥发性电解质。热喷雾适合用来分析极性有机化合物。

热膨胀法 thermodilatometry 在程序控制温度下，测量物质在可忽略负荷时的尺寸与温度的关系的一种技术。由热膨胀法得到的记录曲线称为热膨胀曲线。该法可用于测定高聚物的玻璃化转变温度、高聚物在不同温度下的结晶速率以及研究高分子链段和侧基的运动所产生的各种转变。

“热”谱带 “hot” band 分子从一个振动激发态跃迁到更高能量的振动激发态所产生的吸收谱带。在通常的温度下，振动激发态的分子数目远比基态分子数目少，产生的“热”谱带的强度很弱，频率也低于基频，因经常埋没在基频谱带中，一般不易观察到。只有在高分辨率的气体或蒸汽光谱中才有可能观测到。随着温度

的升高，“热”谱带强度增强。可以观察到“热”谱带。利用“热”谱带数据可以计算分子振动的非谐振性。

热色谱法 chromatothermography 一种利用样品中各组分吸附性能的差异，在色谱分离的同时进行热脱附，以提高分离效率的吸附气相色谱法。样品由载气带入填充吸附剂的色谱柱内，同时借助外部加热使色谱柱温度沿轴向并顺载气方向有梯度变化，利用吸附剂的温度分布对各组分的吸附容量的影响，选择适宜的温度梯度变化和载气流速，可提高分离效能，改善峰形和缩短分析时间。

热色现象 thermochromism 物质的颜色随温度变化的现象。该现象的特点是根据反射光进行热分析，有许多物质由于晶型的转变而发生颜色的变化，因此可根据热色现象进行分析。

热释光现象 thermoluminescence 物质在升温过程中的发光现象，其光强和温度关系的曲线称为辉光曲线。该现象是由电子受热从陷阱向导带移动所引起，因此可从光强最大时的温度和升温速度来估算电子陷阱的深度，并且热释光峰的数目与不同深度电子陷阱的种类相对应。

热丝（带）裂解器 filament pyrolyzer 热丝（带）裂解器是裂解气相色谱中应用最广泛的一类裂解器。所用的热丝材料为铂丝和镍铬丝，加热元件是由直径0.2～0.5mm、长度约50mm的丝绕成的螺旋管，样品直接附在热丝上，热丝通电流后发热，到达平衡温度时样品裂解成小分子碎片产物，通过色谱柱进行分离、分析。这种裂解器结构简单，操作方便，死体积小，但温度上升时间长，温度不均匀，热丝阻值易变，对反应有催化作用。

热天平 thermobalance 在程序控制温度下，连续称量试样质量的仪器。近年来，在热天平的研制上发展较快，除了常压和真空条件下工作的热天平之外，还研制出高压热天平。热天平的基本构造是由精密天平和线性程序控温的加热炉所组成，其结构有卧式和立式两种。由于热天平可精确测定质量的变化，所以它是一种定量分析方法。热天平可用于物质的成分分析、研究物质的热分解过程和热解机理。

热透镜光谱检测法 heat lens absorbance detection 基于热透镜效应的液相色谱检测方法。它以连续激光或脉冲激光作光源，样品将吸收的光能通过非辐射跃迁转变成热能，使样品温度升高的同时也使样品的折射率发生变化，从激光束中心到激光束边沿形成一个折射率梯度，好像一个透镜，测定样品局部折射的变化即可检测到被测物质。与液相色谱中常用的直接测定流动相和样品折射率差的示差折光检测相比，热透镜光谱检测的灵敏度高两个数量级。

热脱附谱 thermal desorption spectroscopy；TDS 逐步加热固体，使物体表面吸附的原子脱附，用四极质谱

计观察脱附气体的种类和数量的谱图。这是一种简单的研究表面状态（吸附热、吸附动力学、表面覆盖度等）的方法。

热微粒分析 thermoparticulate analysis 在程序控制温度下，测量物质释放出的微粒物与温度关系的一种技术。该法是检测聚合物试样在程序升温时逸出的凝集核（半径为 10^{-7} ~ 10^{-5}cm 的粒子），所释放出的微粒物在暗场光学系统中可以散射光，通过光检测器自动记录。

热微量转移薄层色谱法 thermomicro and transfer-application-substanceTLC; TAS-TLC 一种和 TLC 法联用的微量的热提取方法，对药用植物等样品中的成分无需用溶剂萃取，即可直接转移到薄层上进行测定。原理是将适量样品粉末放在耐高温的玻璃加热管内，玻璃管一端拉成直径约 0.8 ~ 1.0mm 毛细管，将它以水平状态放入电炉，管端伸出电炉外 1mm。在距离毛细管端 1mm 处，TLC 板以垂直方向放置，并可移动。将玻璃管及其内容物用电炉加热，不超过 350℃，挥发物在 20s 内逸出，冷凝在正对毛细管出口的 TLC 板上，然后再作 TLC 展开。该法在很多情况下节省了用于萃取、浓缩、转移样品所消耗的时间，对药物、毒物、食品、塑料和挥发油的测定极为方便。

热显微镜 thermomicroscopy 在程序控制温度下，用显微镜观察试样相态、结构和表面形貌与温度的关系的一种技术。该法的特点是可以直接观察试样在加热或冷却过程中的相态、织构和表面形貌的变化。例如对咖啡因的相变和热稳定性的研究，在 141℃ 为 $\beta \rightarrow \alpha$ 转变的吸热峰，236.5℃ 为熔融峰，最后一个峰为蒸发吸热峰。从显微镜可观察到在咖啡因的熔融过程中伴有气泡的产生，表示熔融和蒸发同时发生，这在差热分析曲线上并不能反映出来。

热消偏振光强度法 thermal depolarized light intensity 在程序控制温度下，测量物质的偏振光强度和温度的关系的一种技术。该法广泛应用于固态材料的相变和复杂形态变化的研究，尤其对多晶现象的研究特别有用，因为它可以很灵敏地检测热焓较小而双折射有变化的相转变。

热压成膜法 pressed film technique 红外光谱技术中的一种制样方法。一般采用两块平面光滑的不锈钢模具，用铝片作为控制薄膜厚度的支撑物，通过加压、控温，使样品软化或熔融，然后制成一定厚度的薄膜，冷却，取下薄膜，即可用于红外光谱测试。

热噪声 thermal noise 在一定的温度下，导体中自由电子的不规则热运动而产生的噪声。温度愈高噪声愈大，其频谱极宽。热噪声是一个随机过程，其概率符合高斯分布（正态分布）规律。除电阻热噪声外，气体放电管放电时也产生热噪声。

热值 calorific value 在规定条件下，单位质量的试样完全燃烧时放出的热量，单位为 $kJ \cdot kg^{-1}$ 或

$MJ \cdot kg^{-1}$。在燃料分析中，热值是表示燃料质量的一项重要指标；在食品分析中，热值是表示食物能量的指标，指单位质量的食物在体内氧化时所放出的热量。热值通常用氧弹量热计来测定或计算得到。直接用氧弹量热计测得的热值称为弹热值（bomb calorific value）；从弹热值中减去酸（主要指试样中硫变成硫酸和氮变成硝酸）的生成热及其溶解热后所得到的热值称为总热值（gross calorific value）或最高热值；以总热值减去水的汽化热（指试样中水形成蒸汽和氢燃烧形成的水蒸气在氧弹中再凝结时放出的热）后所得到的热值称为净热值（net calorific value）或最低热值。

热重法 thermogravimetry; TG 在程序控制温度下，测量物质质量与温度的关系的一种技术。热重法可精确测定质量的变化，所以是一种定量分析方法。它广泛应用于无机和有机化学、高聚物、冶金、地质、陶瓷、石油、煤炭、生物化学、医学和食品等领域。热重法大致可用于下列几方面的研究：(1) 物质的成分分析；(2) 物质的热分解过程和热解机理；(3) 水分和挥发物的分析；(4) 高聚物的热氧化降解；(5) 石油、煤炭和木材的热裂解；(6) 氧化还原反应；(7) 反应动力学的研究；(8) 升华和蒸发速率。

热重法与差热分析联用 simultaneous thermogravimetry and differential thermal analysis 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和差热分析进行分析的一种技术。由于一个试样在相同的实验条件下同时进行两种热分析技术的测定，显然可对某些物理或化学过程提供更多有价值的信息。例如热重法与差热分析联用测得高岭土的高温热分解机理为：高岭土（500 ~ 600℃）→脱水的高岭土（980℃）→亚稳态高岭土（1200℃）→γ-Al_2O_3。如果单用热重法则只能测出高岭土的脱水反应，而只用差热分析却无法判断900℃以上的两个放热峰是由于热分解还是相态变化引起的。

热重法与差示扫描量热法联用 simultaneous thermogravimetry and differential scanning calorimetry 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和差示扫描量热法进行分析的一种技术。这种联用技术对研究固体热分解机理和高分子材料的热加工工艺很有用。

热重法与电热分析联用 simultaneous thermogravimetry and electric thermal analysis 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和电热分析的一种技术。该法可用于检测物质及其热分解产物的导电性，例如通过该法可证明 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ 的脱水反应中有液体水存在的中间过程。

热重法与库仑分析联用 simultaneous thermogravimetry and coulometric analysis 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和库仑分析的一种技术。这种联用技术不仅可测定

各种燃料废气中的有害气体，而且还可用于其他微量杂质的检测。总之，在环境监测上它是一种很有效的分析方法。

热重法与热光度法联用 simultaneous thermogravimetry and thermophotometry 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和热光度法进行分析的一种技术。该法可提供有关材料的燃烧特性的信息，例如对高聚物进行分析，可获得降解温度、降解速率、含碳量、着火温度、烟雾强度等有关数据。

热重法与顺磁共振联用 simultaneous thermogravimetry and electron paramagnetic resonance 在程序控制温度下，对一个试样同时采用热重法和顺磁共振进行分析的一种技术。采用这种联用技术的目的是利用顺磁共振仪检测从热重法中分解出来的具有顺磁性的中间体。由于顺磁共振谱图可提供顺磁性中间体的逐步形成和衰减过程，因此可进一步确定材料的热分解机理。

热重分析-傅里叶变换红外光谱联用 thermogravimetric analysis-Fourier transform infrared spectrometer; TGA-FTIR 热重分析法（TGA）是在程序控制温度下测量物质的质量与温度关系的一种技术。而热重分析-傅里叶变换红外光谱联用技术则是用来进行物质在加热时所释放出来的挥发性物质的定性分析。检测方式可以是间歇式检测，但更多的是连续式检测。常规的联机系统主要由热解室（如热天平、热解炉等），接口（包括传输管线）和 FTIR 光谱仪组成。对于红外光谱法来说，只要在 TGA 分析中被分析物所释放的挥发组分有红外吸收，用载气将挥发组分带入红外光谱仪的气体池中，就能用红外光谱法进行定性分析。

热重曲线 thermogravimetric curve 由热重法得到的记录曲线，即 TG 曲线。曲线的纵坐标为质量，横坐标为温度。它表示在升温过程中失重的累积量，因此在热重法中可根据热重曲线计算出各个失重过程的失重，从而推断热分解机理。

热助共振原子荧光 thermally assisted resonance atomic fluorescence 原子吸收辐射受激发后再发射相同波长的辐射，产生共振原子荧光。若原子经热激发处于亚稳态，再吸收辐射进一步激发，然后再发射相同波长的共振荧光，这种共振原子荧光称为热助共振原子荧光。如 In 451.13 nm 就是这类荧光的例子。

人工放射性元素 artificial radioelement 又称人造元素（man-made element）。迄今在自然界所不存在的、只能通过人工核反应获得的放射性元素。已知的人工放射性元素有镅（Am）、锔（Cm）、锫（Bk）、锎（Cf）、锿（Es）、镄（Fm）、钔（Md）、锘（No）、铹（Lr）以及 104 ~ 109 号元素。此外，锝、钷、砹、镎和钚等五个放射性元素的所有核素的半衰期都远小于地球年龄，不可能存在于自然界。然而由于铀的自

发裂变和中子俘获反应，所以在铀矿中含有极微量的锝、钷、镎和钚。存在于铀矿和钍矿中铀和钍的衰变，也存在着极微量的砹。这些元素现在都由人工方法制造，因此也把这些元素列为人工放射性元素。严格地说，它们不算人工放射性元素。

人工基因 artificial gene 指可在体外产生的编码特定多肽链的双链DNA分子。可通过3条途径获得人工基因：(1) 以mRNA为模板进行反转录形成cDNA单链，然后再由DNA聚合酶作用形成双链DNA；(2) 人工合成寡核苷酸作为模板(即人工基因)；(3) 用PCR法扩增任何特定的基因。

人工神经网络 artificial neural network；ANN 一种模拟人脑结构构筑起来的具有良好自适应、自组织、自学习能力的信息处理系统。由类似于神经元的基本处理单元相互连接而成，有输入层、隐含层和输出层，它们之间的连接强度以权表示。输入层不参与任何运算，只传递数据。隐含层参与运算，根据输出函数产生输出信号，传递给下一层的神经元。输出层输出计算结果。神经元的数学模型是心理学家W. S. McCulloch和数理逻辑学家W. Pitts于1943年首先提出。人工神经网络具有自组织、自学习与联想的能力，在学习过程中，利用误差反向传播法，逐步实现网络最优化。运行神经网络，必须经过训练、回响和预测三个阶段。有前馈人工神经网络、反馈人工神经网络和自组织自适应人工神经网络。它具有很强的对不完备或不确定知识的处理能力、预报和容错能力。对于处理灰色、黑色体系与非线性体系的信息有其突出的优点，能实现对物质的定性、定量分析及多组分同时定量分析，检测、校正测量信号，消除干扰分辨重叠信号等，在分析测试领域有着广泛的应用和发展前景。

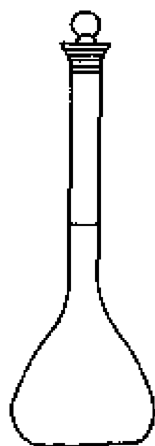
人工智能 artificial intelligence 基于模拟人的感觉和思维过程的规律，研究和设计类似人的某些智能的智能机的一门新的科学技术，是计算科学、控制论、信息论、神经生理学、语言学等多种学科相互渗透而发展起来的。具有学习、联想和推理等三大基本功能，是模仿、延伸和扩展人的智能，实现某些脑力劳动自动化的技术基础。它的理论和方法主要以专家系统的形式应用于实际。

韧致辐射X射线 bremsstrahlung X ray 高能入射电子会在样品原子的库仑场中减速，在减速过程中入射电子失去的能量转化为X射线光子，即韧致辐射X射线。由于减速过程中的能量损失可取任意值，韧致辐射可形成从零到电子束能量的连续X射线，在强度的能量分布上没有特征性。

容量分析 volumetric analysis 又称滴定分析。一类重要的定量分析方法。此法将一种已知浓度的试剂溶液(称标准溶液)用滴定管滴加到待测物质的试液中，根据完成反应所消耗的标准溶液的体积，即可确定试液中

待测物质的含量。该类分析方法简便、快速、准确，特别适合常量组分（含量 > 1%）的测定和大批样品的例行分析。容量分析包括有：酸碱滴定、沉淀滴定、氧化还原滴定、配位（络合）滴定、非水溶剂中滴定等，是一类重要的定量分析方法。

容量瓶 volumetric flask 用于配制一定体积溶液或把一定体积试样溶液稀释到另一更大体积时所用的仪器。体积小至 1ml，大至 1L 或更大的各种容量瓶都有，其形状如下图所示。常为玻璃制，亦有塑料、石英等制品。一定温度（20℃或 25℃）下，当瓶内溶液稀释至瓶颈标线处（溶液弯月面与标线相切）时，其瓶内所盛溶液（量入）体积等于所用容量瓶上所标示的体积。还有少数容量瓶被制成量出型，即将充满至标线处的溶液全部倒出时，其溶液体积等于所用容量瓶上所标示的体积。为了区分上述两类容量瓶，在瓶上分别注有“入”和“出”字样，使用时需加注意。



容量因子 capacity factor 又称分配比、容量比、分配容量。它是衡量色谱柱对被分离组分保留能力的重要参数，用 k' 表示。k' 的定义是某组分在固定相和流动相中分配量（质量、体积或克分子）之比，用公式表示为

$$k' = \frac{\text{组分在固定相的量}}{\text{组分在流动相的量}} = K\frac{V_S}{V_M}$$

式中，K 为分配系数；V_S 为固定相的体积（分配色谱）、表面积（吸附色谱）、孔容（排阻色谱）或交换容量（离子交换色谱）；V_M 为柱内流动相的体积。k' 值大者，在柱内保留强；反之，保留弱；若 $k'=0$，则表示该组分在固定相上不保留，此时测得的保留体积即为死体积（V_M）。参见**死体积**条。

容器捕集法 vessel catcher 是一种环境试样的采集法，此种方法分为袋法和减（加）压容器捕集法。(1) 袋捕集法有两种操作方式，一种是将一定量的试样大气送入由软质氯乙烯、四氟乙烯树脂、聚四氟乙烯、聚对苯二甲酸二乙醇酯等聚合物等制成的过滤器袋子中；另一种是将袋子放在减压容器（袋子容积的 2 倍左右）内并与采样管相连接，在减压到数托压强后（1Torr = 133Pa），待再回到常压时试样大气即为袋子所捕集。前一种方式袋子和泵都不能使用可引起待测成分浓度变化的材料，而后一种避免了泵的污染。(2) 减压容器法又称减压辅集法。系用带有聚四氟乙烯真空旋塞及硅橡胶塞的已知体积的真空玻璃瓶来采样，采样前，压力减

至数托后启开旋塞而捕集气体试样。加压辅集法则用装有两个旋塞的不锈钢罐（5L，耐压 5×10^5Pa），用金属隔膜泵将大气试样加压到 2×10^5Pa，排气后，再行加压捕集气体。

溶出伏安法 stripping voltammetry 通过预电解将被测物质电沉积在电极上，然后施加反向电压使富集在电极上的物质重新溶出，根据溶出过程的极化曲线进行分析的方法。该方法灵敏度极高，其测定范围在 10^{-6} ~ 10^{-11} mol·L^{-1}，检出限可达 10^{-12}mol·L^{-1}，在痕量分析中具有重要意义；仪器结构简单，价格便宜，便于推广；应用范围广，在周期表中，已有30多种元素可进行阳极溶出分析，约20种元素可作阴极溶出分析，可同时测定多种含量在 10^{-9}mol·L^{-1}级甚至 10^{-12}mol·L^{-1}级范围内的元素，而不必预先分离。

溶度积 solubility product 亦称溶度积常数（solubility product constant），即难溶强电解质、固体和其饱和溶液在平衡时的平衡常数，常用 K_{sp} 表示。在数值上等于以平衡系数为方次表示的离子浓度的乘积。例如，$Ca_3(PO_4)_2$(固) $\rightleftharpoons 3Ca^{2+} + 2PO_4^{3-}$，$K_{sp}=[Ca^{2+}]^3[PO_4^{3-}]^2$。$K_{sp}$ 随温度的升高而加大，各类手册中常列出的是25℃的 K_{sp} 值。根据 K_{sp} 的数值可以比较同种类型（AB型或 AB_2 型等）难溶电解质溶解度的大小，K_{sp} 越小，其以摩尔浓度表示的溶解度亦越小。K_{sp} 可用多种实验方法测定。

溶剂泵 solvent pump 向流动相中添加有机溶剂的高压输液泵。要求泵的流路系统耐有机溶剂的性能好。在色谱分析体系中，通常是用来输送有机改性剂来改善流动相的分离效果和色谱峰形状。

溶剂萃取法 solvent extraction method 利用物质在互不混溶的两相中的分配特性不同进行分离的方法。通常是利用与水不混溶的有机溶剂，借助萃取剂的作用，使一种或几种组分进入有机相，而另外一些组分仍留在水相中，从而达到分离和富集的目的。它是一种常用的分离和富集方法，该法具有选择性好、回收率高、设备简单、操作简便、快速，以及易于实现自动控制等特点。

溶剂萃取分离 solvent extraction separation 亦称液-液萃取分离。该法利用与水不相混溶的有机溶剂同试样溶液一起振荡，这时，一些疏水亲油的组分进入有机相中；另一些亲水性组分仍留在水相中，经过静置、分层使两相分开，从而实现分离富集的目的。要将亲水性的无机组分萃取到有机相，必须通过某种反应将其转变为电中性的疏水性化合物（如螯合物、离子缔合物）才能实现。

溶剂浮选-偏最小二乘回归光度法 spectrophotometry by use of solvent flotation and partial least square regression 是在形成离子缔合物的被测体系中加入一种或几种合适的有机化合物，溶解、分离及浮选不溶性离子缔

合物，然后进行分光光度法多波长测定，所得数据用偏最小二乘法处理的一种分析方法。该方法将富集、分离与显色合为一体。可获较高的灵敏度，并能同时对多个组分进行测定。

溶剂化合物萃取 extraction of solvate 液-液萃取的一种类型。某些有机溶剂分子通过其所含的配位原子与无机化合物中的金属离子相键合，形成的溶剂化合物可萃入该有机溶剂中。以这种方式进行萃取的液-液萃取，称为溶剂化合物萃取。例如，用磷酸三丁酯萃取 $FeCl_3$ 或 $HFeCl_4$。杂多酸的萃取体系一般亦属于溶剂化合物萃取体系。

溶剂极性 solvent polarity 色散、偶极、氢键和介电这 4 种作用的总和越大，溶剂和溶质分子之间的相互作用就越强。溶剂和溶质分子以这 4 种方式进行相互作用的能力称为溶剂极性。溶剂极性有多种表达方式，如溶剂极性参数 P' 在色谱中是很有用的数据，此外还有溶解度参数 δ 等。对于大多数溶剂而言，各种溶剂极性参数是相互关联的。

溶剂极性参数 solvent polarity parameter 是衡量溶剂极性的一种尺度。它是基于溶解度数据导出的，在分配色谱中，溶质的保留决定于它在两相间中的溶解度，因此，溶剂极性参数可以较准确地度量分配色谱体系的溶剂强度。

溶剂浸渍树脂 solvent-impregnating resins 将离子交换树脂浸泡在萃取剂里，使树脂交联的骨架内含有萃取剂。它成功地用于金属离子的分离。经改进后的浸渍树脂是将大孔树脂先浸在含有萃取剂的石油醚溶液中，然后过滤，并将树脂置于真空中，缓慢地蒸发掉石油醚稀释剂。浸渍树脂中的萃取剂是以均匀的液层，甚至以单分子层分布在整个树脂孔隙的表面。溶剂浸渍树脂弥补了离子交换和溶剂萃取各自的不足，制备简便。选用大孔型 Amberlite XAD-2 树脂、阿拉明 336 和 D_2EHPA（二-2-乙基己基磷酸）等萃取剂，浸渍树脂能含有 40% D_2EHPA、吸附锌的容量为 19.1mg · g^{-1} 树脂。目前这种树脂已用于铀、铜和钴等元素的分离。

溶剂强度 solvent strength 在液相色谱中，指有机溶剂对样品的洗脱能力。它是描述溶剂色谱性能的主要指标，目前尚无统一标准定量描述不同类型液相色谱体系中的溶剂强度，通常用相对极性和溶解度参数等作为溶剂强度指标。

溶剂效率 solvent efficiency 又称作“选择性因子”，用 α 表示。它与相邻两物质在固定相上的相对保留值 r_{12} 相关，取决于欲分离的两物质和固定相（液相色谱中还与流动相）之间作用能力的差别，其差别越大，越有利于固定相对两个物质的分离。α 表征了色谱的热力学过程，选择合适的固定相，可以提高溶剂效率，达到改善分离的目的。参见**相对保留值**条。

溶剂效应 solvent effect 通常指

溶液中的化学平衡、反应速度受溶剂种类的影响发生变化的现象。有的溶剂效应只影响反应速度，有的则会改变反应机理。离子反应在气相中不易进行，在极性溶剂中很容易进行便是典型的溶剂效应。溶剂效应对光吸收与发光影响很大，常常使最大吸收或发射峰移动或峰强度发生变化。溶剂效应分一般溶剂效应和特殊溶剂效应。前者指溶剂折射率、介电常数的影响，符合 Lippert 方程；后者则指吸光或发光质点与溶剂分子间的氢键作用、配合作用等。

核磁共振分析中，溶剂效应则是指化学位移随溶剂不同发生变化的效应。溶剂对核屏蔽的总效应可由五项组成：$\sigma(溶剂) = \sigma_B + \sigma_W + \sigma_A + \sigma_E + \sigma_H$，式中，$\sigma_B$ 是溶剂本身磁化率的贡献，采用内标时，这项作用很小，一般不予考虑；σ_W 是溶剂分子与溶质分子之间的范德华力的作用，可稍微改变化学位移，对 δ (^1H) 移动 0.1 ~ 0.2，对其他核可能大些，但相对于它们的化学位移来说仍是小的；σ_A 是溶剂分子的磁各向异性对溶质产生具有方向性的平均效应，在含有芳香基团的溶剂中，有时会使 δ (^1H) 移动 -0.5，含有三重键（$C\equiv C$, $C\equiv N$）的溶剂会使 δ (^1H) 移动 + (0.2 ~ 0.4)；σ_E 是溶剂分子的电场效应；σ_H 是指形成氢键的作用，这是一种特殊的溶质-溶剂间的相互作用，当存在氢键时，则它对化学位移的影响是主要的。溶剂效应对耦合作用的影响比对化学位移的影响要小，对弛豫和化学交换有时有很大影响。

溶解度参数 solubility parameter 是衡量溶剂极性的一种尺度。一个给定液体的总溶解度参数值决定于纯液体中色散相互作用、偶极相互作用和氢键相互作用三个参数的总和。对于某一特定样品类型，三个参数中的任何一个都可能是溶剂强度的较好度量。

溶解氧 dissolved oxygen；DO 溶解于水中氧的量，以每升中氧气的毫克数表示。溶解氧是评价水体自净能力的指标。溶解氧含量较高，表示水体自净能力较强；溶解氧含量较低，表示水体中污染物不易被氧化分解，鱼类也因得不到足够的氧气，窒息而死。这时，厌氧性菌类就会繁殖起来，使水体发臭。水中溶解氧的含量同空气中氧的分压、大气压力和水温有直接关系。在正常情况下，地面水中溶解氧应接近饱和状态。

溶菌酶 lysozyme 一种自然存在于蛋白、人的眼泪、唾液或其他体液之中的酶，能够毁坏某些细菌的细胞壁，从而可以用作温和的抗菌剂。

溶血试验 hemolytic test 细菌学中的溶血试验通常是检查某种细菌能否溶解血平板上的红细胞。如果能溶解，在血平板上菌落周围会出现完全透明的溶血环。免疫学上的溶血试验是红细胞与相应的抗体（溶血素）结合，激活补体所致，属抗原抗体反应。

溶血素 hemolysin 在血清学和细

菌学方面将可以产生溶血反应的生物学因子称为溶血素。它损害红细胞膜，使血红蛋白溢出。补体结合性强的抗体，溶血性链球菌的链球菌溶血素O（SLO）等某种细菌所分泌、具有溶血作用的毒素，均属这类因子。前者称为免疫溶血素，后者称为细菌性溶血素，以示区别。免疫溶血素是以异种红细胞为抗原给动物施行免疫时在血液中形成的，在补体存在下仅对抗原红细胞发生特异性溶血。

溶液法 solution method 用样品溶液获得谱图的一种方法。对于固体样品，用合适的溶剂溶解。对于一些红外吸收很强的液体，用调节厚度的方法仍然得不到满意的谱图时，可用合适的溶剂稀释液体样品降低浓度后再测定样品的谱图。由于溶剂本身也具有红外吸收，要获得整个红外区的光谱是不可能的。在定量分析中，应选择对分析谱带无干扰的溶剂，如果一种溶剂不理想，可使用混合溶剂。

溶液性能检测器 solution property detector 又称整体性质检测器。参见**整体性质检测器**条。

溶原性 lysogeny 指一个噬菌体以原噬菌体形式在细菌中作为细菌基因组的一个稳定的成分而存活的能力。原噬菌体基因在宿主细胞中受到抑制，如将宿主细胞用紫外线处理，原噬菌体基因可发生去抑制作用，生成完整的噬菌体DNA，随后细菌细胞溶解。

溶胀 swelling 在液相色谱中，指有机聚合物基质的填料在与流动相溶液接触后体积膨胀的现象。

溶质挥发干扰 solute volatizing interference 这类干扰是由于去溶颗粒的挥发速度或挥发度发生变化而引起的，而且与各种火焰光谱法都相同。溶质挥发干扰一般是由于干扰物质的存在而引起了一种新的固体相造成的，这种固体相在火焰中有不同的热稳定性，因此溶质挥发干扰主要是取决于被测元素和干扰物质的化学性质，故有时称为化学干扰。

溶质性质检测器 solute property detector 基于被测溶质（样品）的某一物理或化学性质的检测器。在特定的色谱条件下，它只对溶质的性质敏感，而流动相本身却不具有这种性质。如紫外检测器测定就是一种溶质性质检测器，它是检测在特定波长下溶质的紫外吸收强度，而在此波长下流动相无吸收。

熔炼分析 melting analysis 在钢液浇注过程中按规定方法采取样锭，然后进一步制成试样对其进行的化学成分分析。熔炼分析结果表示同一炉或同一罐钢液的平均化学成分。

熔融 fusion 用适当的熔剂与试样一起在高温下加热使试样分解的过程。熔融法一般仅用于溶剂不能分解的试样。根据熔剂的性质可分为碱熔法和酸熔法，碱熔法适用于分解酸性试样如硅酸盐、硫酸盐等，常用熔剂有 Na_2CO_3、K_2CO_3、NaOH、Na_2O_2 或它们的混合物；酸熔法适用于分解

碱性或中性物料，如 TiO_2、Al_2O_3、Cr_2O_3、Fe_3O_4、ZrO_2 及钛铁矿、碱性或中性耐火材料等，常用的酸性熔剂有 $K_2S_2O_7$ 或 $KHSO_4$。为避免熔融时坩埚材料混入试样，必须根据熔剂及试样组成选择适宜材料的坩埚。

熔融指数 melt index; MI 又称熔融流动指数。是一项反映熔体流动特性及分子量大小的指标。热塑性树脂在温度为 190℃、时间为 10min，负荷为2160g 时，通过直径为 0.2cm (0.0825in)的流变仪小口时以克计的熔体量。工业上常用以区分不同牌号的聚乙烯树脂，亦用来估价丙烯酸类、ABS、聚苯乙烯、聚酰胺等树脂。MI 值越低，树脂的分子量越高。聚乙烯树脂的熔融指数通常在0.1～20。

熔珠试验 bead test 一种干法定性分析法。将硼砂（四硼酸钠）或磷酸氢铵钠等熔剂附着在带玻璃棒的铂丝环上，先在火焰上加热形成熔珠，然后熔珠蘸上待测金属盐溶液再加热，根据熔珠在氧化焰或还原焰，以及在加热或冷却时的颜色，可以初步判断试样中含有哪种元素。例如，对含有 Cu 盐的溶液，硼砂珠反应在氧化焰中加热时呈绿色，冷却后呈淡蓝色；在还原焰中加热时呈无色，冷却后呈红色。

绒毛促性腺传感器 human chorionic gonadotropin sensor 用于监测绒毛促性腺的传感器。绒毛促性腺为一雌性激素，是中断早期妊娠的重要指标。

融合点 coalescence point 化学交换实际上是同一物种的一个简并体系的相互转变，如 N、N'-二甲基酰胺类化合物，由于酰胺 C—N 键具有部分的双键性质，因此 N-甲基间不便自由互换位置而存在着与 C＝O 基呈顺式和反式位置。N-甲基在此两位置几率相等，且线宽也一样。当体系温度由低温逐渐升至高温时，N-甲基获得动能，克服旋转位垒而互相交换。NMR 谱由两个甲基单峰逐渐靠近而合并，继续变成尖锐单峰。这个由“双”峰线型刚刚合并成单宽峰线型的点称为融合点，该温度称为融合温度。通过对变温实验的分析可获得该内旋转过程的旋转位垒和一系列反应速度常数。任何化学交换的体系，当改变温度或 pH 值等条件时将发生谱峰的峰位与峰形的变化，当体系的多峰刚好重叠为一个峰时称为融合，此时温度值或 pH 值被称为融合点的温度或融合点的 pH 值。参见**化学交换**条。

肉类及肉制品分析 meat and meat product analysis 肉和肉制品分析包括盐分、脂肪、水分、淀粉、化学残留物含量测定与营养分析等。

肉制品分析 meat products analysis 有关各种肉类的分析技术。肉与肉制品的品种很多，有鲜、冻畜禽肉及腌腊肉、火腿、酱卤肉、灌肠制品、烘烤肉、熟干肉等，分析监测项目也有专门规定。鲜冻畜禽肉的卫生标准包括挥发性氨、汞污染残留的允许量规定。肉制品的卫生标准包括亚硝酸

盐、多环芳烃-苯并[a]芘的要求，对肉制品在加工后的水分和酸价的范围也有控制指标。

蠕动泵 peristaltic pump 是由驱动电机、泵头、压盖（或带）、压力调节装置和泵管几部分组成的。常用的电机有同步电机、可逆电机和步进电机。泵头多为由8支滚柱组成的滚轮，要求用耐磨和耐腐蚀材料精密加工制成，滚轮与电机的转轴要求严格同心。压盖分为多道一体式、分道式和压带式。前两种对压盖的曲率要求很高。压力调节装置要求易调和调后不自行变化。泵管最常用的是Tygon（又称PVC，即聚氯乙烯）泵管和硅橡胶泵管。蠕动泵的工作原理是泵管在泵头和压盖之间连续受到挤压，使泵管具有吸液和输液的功能。流速是由泵头的转速、泵管的内径和压盖的压紧程度决定的。蠕动泵价格比较便宜，能满足FIA和CFA的要求。

乳剂特性 *emulsion characteristic* 是感光乳剂的感光特性。感光乳剂中的光敏物质为银的氯、溴及碘化合物。其中以溴化银的感光速度最快，使用范围广，是乳剂的主要感光成分。把卤化银与精制的明胶混合便可制成乳剂。乳剂受到光的照射后溴化银乳剂分解成溴原子和银原子。当银的质点达到一定程度时就形成潜影中心。显而易见，单位时间内乳剂受到光量子的数目越多，则光化学反应进行得也就越快，生成的银原子也越多；经显影后所成像也就越黑。因此银原子的多少，即谱线的黑度就反映了光的强度。

乳剂特性曲线 emulsion calibration curve 强度为I的光，在感光乳剂上产生一定的照度E，照射时间t后，在感光乳剂上积累一定的曝光量$H=Et$。黑度S与曝光量H的关系曲线，称为感光板的乳剂特性曲线。$S=\gamma\log H-i$，式中，γ是乳剂特性曲线直线段的斜率，称为反衬度；H是曝光量；i是与惰延量有关的系数，惰延量的倒数表示乳剂的灵敏度。

乳胶附聚型离子交换剂 latex-agglomerated ion exchanger 将粒径比基质粒径小得多的聚合物微粒（乳胶颗粒），通过静电作用力和范德华力凝聚在基质的表面制得的离子交换剂。如将高交换容量的全胺化多孔聚合物微粒（粒径约为0.1μm）附聚到表面磺化的聚苯乙烯共聚物基质（粒径5～25μm）表面，即得到乳胶附聚型阴离子交换剂。

乳胶凝集试验 latex agglutination test; LA 将特异性抗体（或抗原）吸附于乳胶颗粒上，通过此吸附抗原（或抗体）的乳胶颗粒与相应抗体（或抗原）结合，在一定条件下产生可见凝集反应，以达到快速检测的目的。

乳制品分析 milk products analysis 有关乳类的分析技术。乳与乳制品是营养丰富、容易消化吸收的食品，其品种范围包括消毒牛奶及酸牛乳、全脂牛乳粉、淡炼乳、甜炼乳、奶油、硬质干酪等乳制品。其卫生标准对于

鲜乳要求密度、脂肪、酸度符合一定指标外，还包括汞、六六六、滴滴涕、黄曲霉素等污染残留的允许量指标。对加工后的乳制品除上述鲜乳的部分指标外，还有铅、铜和锡等金属指标。

入射狭缝　entrance slit　是单色器的组成部件之一。入射狭缝也是狭缝的一种，由两片经过精密加工，且具有锐利边缘的金属片组成，其两边必须保持互相平行。单色器的人射狭缝起着光学系统虚光源的作用。光源发出的光照射并通过入射狭缝，经色散元件分解成不同波长的单色平行光束，经物镜聚焦后，在焦面上形成一系列狭缝的像，即所谓的光谱。因为入射狭缝的任何缺陷都直接影响谱线的轮廓与强度的均匀性，所以对狭缝要仔细保护。

软电离　soft ionization　低能量电离方式的总称。传统的电子电离（EI）方式，是用较高能量（70eV）的电子使样品分子电离，被称为硬电离方式。而后来发展的 CI/DCI、FI/FD、FAB、ESI、APCI、MALDI 等各种电离方式，在电离过程中几乎没有额外的内能传递给样品分子，形成的分子离子一般不再分解，所获得质谱主要是分子离子或准分子离子，这些电离方式通称为软电离技术。

软脉冲　soft pulse　周期长而强度弱的脉冲。

软脉冲电子自旋回波包络线调制　soft pulse electron spin echo envelope modulation　采用选择性脉冲的电子自旋回波包络线调制（ESEEM）。常规的双脉冲 ESEEM 是同时激发和检测所有的允许和禁阻跃迁，而软脉冲 ESEEM 则是激发和检测其中某一跃迁。具体方法是将常规的双脉冲 ESEEM 的脉冲序列（$90°-\tau-180°-\tau-$回波）中的 180°脉冲分为两个 90°脉冲，形成三脉冲序列（$90°-\tau-90°-\tau'-90°-\tau-$回波），并且使用不同的微波频率，即前两个 90°脉冲为 ν_1，而第 3 个 90°脉冲为 ν_2（与此等价的序列是 3 个 90°脉冲的频率均为 ν_1，但在施加第 3 个 90°脉冲时同时施加脉冲磁场）。这样若第 1 个 90°脉冲选择性激发了某一个 ESR 跃迁，则在平面上产生电子自旋相干并在 τ 时间内逐步去相干；第 2 个 90°脉冲使该相干以纵向磁化的形式保持在 $-z$ 轴方向上；若 τ'（$>\tau$）时间后施加的第 3 个 90°脉冲的频率与另一个 ESR 跃迁（与前一个跃迁具有共同能级）的频率相近，则会在平面上再次形成电子自旋相干，并在 τ 时间后产生回波。整个过程中的去相干和再次形成相干分别涉及到两个不同的跃迁。与常规双脉冲 ESEEM 相比，软脉冲 ESEEM 所采用微波脉冲的能量要低很多（故称为软脉冲），并且可观测大于 100 MHz 的核跃迁频率。

软（质）凝胶　soft gel　指机械强度较低、不耐高压的凝胶填料。常见软凝胶有交联葡聚糖、天然琼脂糖和合成的交联聚丙烯胺等，它们在有机溶剂中产生溶胀，只适合于水和较强

极性的有机溶剂（如甲醇、乙醇等低级醇）体系。

软X射线源 soft X-ray source 是指X射线的能量比较低的一类X射线。一般把能量在2000eV以下的X射线称为软X射线。在光电子能谱分析中常用的Mg K_{α} 和Al K_{α} 均属于软X射线。软X射线的穿透能力相对较弱，具有较高的能量单色性。

瑞利比 Rayleigh ratio 通常用来表征一个体系的散射能力，它与入射光强和检测器件的几何形状无关，而只与散射体系的本身性质有关，可以用下列公式表示。

$$R(\theta)=\frac{I_S r^2}{I_0 V_S}$$

式中，I_0 为入射光强；I_S 为散射光强；r 为空间任意一点到原点的矢径；V_S 是散射体积；θ 是散射角。

瑞利判则 Rayleigh criterion 由于光的衍射，一个发光点的像点光强分布不是均匀的，而是由中心亮点与环绕它的许多同心环形成的弥散斑（称为Airy斑）、亮点及各同心环之间由强度为零的暗环分隔。将Airy斑的强度分布看成曲线，成为在峰值最大的中央极大两侧有对称分布峰值强度逐渐减小的各次级极大，彼此间有强度为零的第一极小、第二极小、……。若两像点彼此移近，直至一个像点Airy斑的中央极大与另一个像点的第一极小正好重合时，此时合成强度分布曲线上在两个中央极大之间有约20%的凹陷，瑞利判则认为此时两个像点刚刚能被分辨成两点像；若两像点再移近些，则凹陷深度减小，就不再能被分辨开，只能看成一个点像了。所以，瑞利判则是从衍射花样角度提出最小可分辨的判断根据，是光学（光谱）分辨率的公认判则。

瑞利散射 Rayleigh scattering 光子与分子相互作用时，若仅是光子的运动方向发生改变，而光子与分子之间没有能量改变，即散射光的频率与入射光频率相同，这种散射称之为瑞利散射。

弱磁性 feeble magnetism 包括顺磁性和抗磁性，是指引起磁性的电子自旋间的相互作用弱，自旋没有自发取向时的弱的磁性，即因热运动抑制了由交换相互作用所引起的自发磁化的形成。具有弱磁性的物质称为弱磁体，其磁化率均较小。但通常反铁磁性不包括在内。

弱碱性阴离子交换树脂 weak-base anion exchange resin 离子交换功能基团为弱碱（如伯、仲和叔胺）基团的阴离子交换树脂。弱碱性树脂的品种较多，其基本骨架是交联聚苯乙烯，经过氯甲基化后，用不同的胺化试剂处理而获得。如与六亚甲基四胺反应可得伯胺树脂，与伯胺反应可得仲胺树脂，与仲胺反应可得叔胺树脂。

弱煤 weak pitch ESR标准样品煤样的一种，一般主要用于确定ESR谱仪的灵敏度及信噪比。相对于强煤而言，弱煤中的煤炭含量很低（KCl中含0.0003%的煤）。其 g 值也

为2.0028。

弱耦合系统 weak coupling system AX，A_2X，A_3X，A_2X_2 和 AMX 系统等都是弱耦合自旋系统，任何不等同核间的化学位移差均远大于它们之间的耦合常数，即 $\Delta\delta \gg J$。它们的谱属于一级分裂谱，都可用（$2nI+1$）规律来处理。$I=\frac{1}{2}$ 核则符合（$n+1$）规律。这时谱线强度比应按二项式系数之比决定，δ 与 J 值可从谱图上直接读出。

弱束暗场像 dark-field image of weak beam 在中心暗场内用弱衍射斑点形成的衍射图案。在研究晶体缺陷方面应用广泛，比明场像和中心暗场像有更高的分辨率。实验时使样品相对电子束远离布拉格反射位置，利用极弱的一阶衍射束作中心暗场像，在晶体的位错中心附近，总有些晶面能满足布拉格条件而形成强衍射束，他们在弱束暗场像中呈现为衬度较强的细节。

弱酸型阳离子交换树脂 weak-acid cation exchange resin 这种阳离子交换树脂以含羧酸基的为多，母体有芳香族和脂肪族两类。聚合单体可以采用甲基丙烯酸或丙烯酸，二乙烯苯作为交联剂。

弱酸性阳离子交换剂 weakly acidic cation exchanger 离子交换功能基团为弱酸（如羧酸）基团的阳离子交换剂。适合于碱金属和碱土金属离子的同时分离，以及过渡金属离子的分离。

弱铁磁性 weak ferromagnetism 与铁磁性一样显示磁滞回线，具有残留磁化，但其自发磁化强度 M_0 只有通常铁磁性的$^1/_{1000}$ ~ $^1/_{10000}$ 的磁性称为弱铁磁性。若磁化强度为 M、磁场强度为 H，磁化曲线由 $M=M_0+\chi H$ 描述，与反铁磁性一样，磁化率 χ 在 M_0 消失的温度时具有极大值。在反铁磁体中，若原子（或离子）的磁矩微小地偏离反平行排列方向，可产生弱铁磁性。

S

撒样法 sample blow in technique 是将试样均匀撒入水平交流弧光中进行蒸发、分析的方法。与直立电极装样法相比其主要特点是：（1）水平电极撒样法在燃弧时间内，能保证大量试样均匀进入弧焰，发射谱线强度大，因而能改善绝大多数易挥发元素和中等挥发元素的检出限；（2）由于发射谱线强度大，因而可以缩短曝光时间（约需10～15s），提高分析速度；（3）在燃弧时间内，试样始终均匀不断地进入分析间隙，因而弧焰中元素的浓度保持不变，弧焰稳定，分馏效应减小，元素谱线强度在燃弧时间内比较稳定，从而提高分析结果的再现性；（4）由于分馏效应减小，不同元素的谱线几乎同时出现，因而无法利用分馏效应来避免谱线的干扰；（5）在试样撒入弧焰的过程中，无法保证试样的充分蒸发，使某些难挥发元素的检出限变坏。

萨氏法 Somogyi method 一种测定还原糖含量（质量百分数）的方法。样品用水或乙醇溶液提取，澄清液与过量的碱性铜盐溶液（萨氏试剂）共热，获得氧化亚铜沉淀在酸性条件下溶解，与过量碘化钾标准溶液反应生成一定量的游离碘，用硫代硫酸钠标准溶液回滴，根据硫代硫酸钠标准溶液消耗量，由以下公式计算样品中还原糖的含量（质量百分数）。

$$还原糖含量 = \frac{(V - V_0) \times S \times f}{m \times \frac{V_2}{V_1} \times 1000} \times 100\%$$

式中，V、V_0 分别为回滴样品和空白溶液所消耗硫代硫酸钠标准溶液的体积，ml；S 为还原糖系数（$mg \cdot ml^{-1}$），即 1ml 0.005$mol \cdot L^{-1}$硫代硫酸钠标准溶液相当于还原糖的量；f 为硫代硫酸钠标准溶液浓度校正系数，f = 实际浓度/0.005；m 为样品质量，g；V_1 为样品提取液总体积，ml；V_2 为测定时使用样品提取液的体积，ml。

塞曼变宽 Zeeman broadening 由于在强磁场中谱线分裂所引起的变宽。在通常的原子吸收光谱分析条件下可以不予考虑。参见**塞曼效应**条。

塞曼分裂 Zeeman split 见**塞曼效应**条。

塞曼能级 Zeeman energy levels 见**塞曼效应**条。

塞曼效应 Zeeman effect 外磁场与电子磁矩相互作用，克服电子自旋态的正常简并度的效应。在磁场作用下，谱线分裂为几条偏振化组分，可以观察到塞曼效应。分裂后谱线的间隔与磁感应强度成正比；谱线成分沿磁场方向观察是左、右圆偏振光，沿垂直于磁场方向观察是相互垂直的两种线偏振光。塞曼效应是塞曼（P. Zeeman）在 1986 年发现的。由

于当时的经典电磁理论不能完全解释这一现象，在历史上将符合洛伦兹理论的谱线分裂现象称为正常塞曼效应，将其他不符合洛伦兹理论的谱线分裂现象称为反常塞曼效应。在正常塞曼效应中，每条谱线分裂为三条，中间的一条称为 π 组分，其频率不受磁场的影响；位于两侧的其他两条称为 $\sigma^{\pm}$ 组分，其频率则发生与所施加的磁感应强度成正比的改变。在反常塞曼效应中，每条谱线不只分裂为三条，而是分裂为更多条，究竟分裂为几条，由谱线的性质决定。现在知道，反常塞曼效应是原子谱线分裂的普遍现象，而正常塞曼效应反而是特殊现象，仅仅是在原子的电子的总自旋和总自旋磁矩为零，只有轨道磁矩时才出现的特殊现象。只有单线结构的谱线才表现为正常塞曼效应，双重线和更复杂的谱线在弱磁场中均表现为反常塞曼效应。

塞曼效应校正背景(法) Zeeman effect background correction 基于谱线在外磁场作用下发生分裂后波长不同及其偏振特性校正背景的方法，1969年由普尔格（M. Prugger）和托尔格（R. Torge）提出。塞曼效应校正背景分光源调制法和吸收线调制法两大类，以后者应用最广。吸收线调制法分恒定磁场和可变磁场两种调制方式。恒定磁场调制方式是在原子化器上施加一垂直于光束方向的恒定磁场，在磁场的作用下，吸收线分裂为 π 和 $\sigma^{\pm}$ 组分，前者平行于磁场，与吸收线的波长相同，后者垂直于磁场方向，波长偏离于吸收线波长。光源共振发射线通过起偏器后变为偏振光，随着起偏器的旋转，某一时刻有平行于磁场方向的偏振光通过原子化器，吸收线 π 组分和背景产生吸收，测得原子吸收和背景吸收的总吸光度；在另一时刻有垂直于磁场方向的偏振光通过原子化器，由于偏振方向不同，不产生原子吸收，但仍产生背景吸收，测得的只是背景吸光度。两次测得的吸光度之差，便是扣除了背景吸收的净原子吸收的吸光度。可变磁场调制方式是原子化器上加一电磁铁，电磁铁仅在原子化阶段被激磁。在零磁场，测得原子吸收和背景吸收的总吸光度；当激磁时，固定的检偏器除去平行于磁场方向的偏振光组分，只让垂直于磁场方向的偏振光组分通过原子化器，测得背景吸收的吸光度。两次测得的吸光度之差，便是扣除了背景吸收的净原子吸收的吸光度。塞曼效应校正背景的优点是：(1) 能在190～900nm全波范围内校正背景；(2) 在分析线或非常接近(0.01nm) 分析线波长处校正背景，测量和参比光束来自同一光源，精确地通过同一光路和分析体积，以一个简单的光学系统获得了真正的双光束仪器的效果，不仅能补偿光源的波动和漂移，而且也能补偿火焰波动的影响，即使在标尺扩展倍数很大时，基线仍然非常稳定；(3) 校正背景的能力强，能有效地校正吸光度高达2.0的背景吸收，且能校正结构背景；(4) 用

谱线分裂后的 π 和 $\sigma^{\pm}$ 组分分别进行吸收测定，可以扩展工作曲线的线性动态范围。缺点是校正曲线有翻转现象。采用恒定磁场调制方式，有些元素的测定灵敏度比常规原子吸收光谱法有所降低，采用可变磁场调制方式，测定灵敏度已基本接近于常规原子吸收光谱法。

塞曼原子吸收光谱法 Zeeman atomic absorption spectrometry；ZAAS 利用塞曼效应校正背景的原子吸收光谱法。1976 年日本日立公司推出了第一台塞曼效应扣除背景的原子吸收光谱仪器。1990 年美国 Perkin-Elmer 公司生产了世界上第一台横向加热纵向磁场调制石墨炉原子吸收光谱仪器，靠辐射热加热石墨炉，炉内温度分布均匀，获得了最佳的等温原子化条件，有效地降低和避免基体效应和记忆效应。光源发射光束方向平行于磁场，观测的是纵向塞曼效应信号，检测不到 π 组分，当不通电激磁时，与通常的原子吸收光谱分析一样，测得的吸光度是原子吸收和背景吸收两者吸光度之和；当通电激磁时，共振吸收线分裂为 $\sigma^{\pm}$ 组分，共振发射线位于 σ^{-} 与 σ^{+} 组分波长的中间，不为分析原子所吸收，仅为背景吸收，两次测量吸光度相减，能有效地校正背景，同时分析灵敏度又没有任何损失。

塞式流 plug flow 一种液流流型，电渗流的流型为扁平型，也称“塞流”。而 HPLC 的液流流型为抛物线状。

塞式流动 plug flow 流体的一种流动方式，在色谱分析中是指在进样时，样品（流体）在瞬间内是以“塞子”式的方式流入色谱柱的进口端，也即样品不被流动相所稀释。这种流动方式可使样品在柱端形成最窄的初始谱带宽度，达到获得较高柱效的目的，只有快速进样时才能实现塞式流动。

赛义尔方程 Sayre equation 测定晶体结构的直接法中的基本公式。其具体形式为

$$F_{hkl} = \Omega_{hkl} \sum_{h'} \sum_{k'} \sum_{l'} F_{h'k'l'} F_{h-h',k-k',l-l'}$$

式中，F_{hkl}、$F_{h'k'l'}$ 和 $F_{h-h',k-k',l-l'}$ 分别是衍射 hkl、$h'k'l'$ 和 $h-h'$、$k-k'$、$l-l'$ 的结构因子；Ω_{hkl} 是简单的标度因子。上式从表面上看并无用处，因为要测定一个结构因子需要事先知道所有其他有关结构因子的相角和数值，但是，对于中心对称的空间群而言，当加和式中有一个乘积数值较大，对加和值起决定作用，而且 F_{hkl} 的绝对值也很大时，通常就可以用这个乘积定出 F_{hkl} 的相角。在实际工作中，就是选绝对值大的归一化结构因子 $E_{h'k'l'}$ 和 $E_{h-h',k-k',l-l'}$ 推导求出 E_{hkl} 的相角，也就是 F_{hkl} 的相角。

三标准试样法 method of three standard samples 根据公式 $\lg R = b\lg c + \lg A$ 用内标法进行光谱定量分析中，常以一套已知含量的标准样品做出 $\lg R$-$\lg c$ 工作曲线，然后根据试样的分析线对相对强度对数 $\lg R_x$，在工作曲线上求出 $\lg c_x$，进而求出元素含量 c_x。采用 $\lg R$-$\lg c$ 工作曲线时，

曲线的斜率等于自吸系数 b。由于制作工作曲线的标准数目一般至少有三个，因此这种方法称为三标准试样法。

三重态 triplet 原子和分子中可以有多于一个的未偶电子。例如，氧分子有 16 个电子，根据分子轨道理论，其中最外层的两个电子具有相平行的自旋，因而呈现不为零的净磁矩。这种含有两个自旋平行的未偶电子的分子称为三重态分子。除了氧分子那样的基态三重态外，不少原子和分子可以通过激发而形成激发三重态。

三重态机理 triplet mechanism; TM 三重态机理是解释化学诱导动态电子极化的理论之一。一般在零磁场下从激发单重态到激发三重态的系间窜跃的速度因子能级的不同而不同，所以在磁场中的三重态分子会发生自旋极化，这样的三重态分子发生分解或夺氢反应生成自由基对时，这对自由基会继承这个自旋极化，这就是三重态机理。

三刺激值 tristimulus value 是按三原色理论用三个数值来表示任何一种颜色的客观方法。曾取红绿蓝为三原色构成三原色系统，并以 RGB 三个斜体字母表示三刺激值，称为 RGB 色度系统。现在多采用标准色度系统，并以斜体 *XYZ* 表示三刺激值。平常用色品坐标表示，在标准刺激系统中，以小写斜体 x, y, z 表示。

$$x=\frac{X}{X+Y+Z};\quad y=\frac{Y}{X+Y+Z};$$

$$z=\frac{Z}{X+Y+Z}$$

因此，$x+y+z=1$。

三电极体系 three-electrode system 由工作电极、对电极和参比电极三根电极构成的体系。

三电极氩等离子体 three electrodes argon plasma 它是直流等离子体的一种，通常使用的工作气体为氩气，因此又称为三电极氩直流等离子体。直流等离子体按电极配置方式基本有三种类型：垂直式双电极直流等离子体、倒 V 形双电极直流等离子体和倒 Y 形的三电极直流等离子体。三电极直流等离子体由于采用了双阳极（成倒 V 形）和一个阴极，使整个喷焰（直流等离子体）处于电场控制下，因此三电极直流等离子体具有很好的稳定性。三电极等离子体的两个阳极是碳棒，阴极是钨棒，三个电极外面均有陶瓷套筒并通有电极气——氩气。三个电极同时从套筒中伸出相触后拉开（如同直流电弧相触引燃）。为了便于引燃，钨阴极常含有少量钍。样品以气溶胶形式向上送入两阳极弧柱交叉点下方的三角区——激发区，在该区域内的不同位置将分别得到各元素谱线的最大强度值。观测区位置与谱线性质和电极气及载气流量有关。它具有检出限低、稳定性好、运行成本低、基体干扰大等特点。

三方晶系 trigonal system 一种中级晶系，晶体所属点群的特征对称性是在一个方向上具有三重对称轴。三

方晶系的晶胞有两种类型——菱面体晶胞和六方晶胞。菱面体晶胞的晶胞参数之间的关系为 $a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma\neq90°<120°$，选取晶胞时，应以三个与三重轴交成等角的晶棱作为晶轴；六方晶胞的晶胞参数之间的关系为 $a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$、$\gamma=120°$，选取晶胞时应使三重轴平行于 c 轴。三方晶系的晶体点阵按六方晶胞划分时，一部分可得素晶胞；另一部分为复晶胞。六方复晶胞中含有三个点阵点，除了 8 个顶角上的点阵点之外，晶胞中（2/3，1/3，1/3）和（1/3，2/3，2/3）处还有两个附加的点阵点。菱面体晶胞和六方复晶胞都是 R 心格子的基本单位，二者之间是可以互相转换的。

三缝燃烧器 three-slot burner 一种有三条平行排列的缝型燃烧口的燃烧器。用大块不锈钢或钛钢制作，以防止燃烧缝在高温下变形。它的优点是可以允许使用较高含盐量的试液，减少了周围空气扰动对测定的影响，降低了火焰噪声，有效吸收光程长。但燃料消耗量大，发热量大，易引起燃烧缝变形，为此常用水冷却燃烧器。

三共振 triple resonance 一个试样中有 3 个或 3 个以上的耦合核组成的系统，或有耦合关系的 3 个自旋系统，在激发两个核或两个自旋系统的同时观测第 3 种核或自旋体系的跃迁，使 3 个核或 3 个自旋系统同时发生共振现象。此时谱仪必须备有 3 个射频发射系统。

三级四极杆质谱仪 triple quadrupole mass spectrometer 由四极杆质量分析器构成的质谱仪器。属于低分辨质谱仪。特点是体积小，扫描速度快，每秒可扫描数千质量单位，可采集十几乃至几十张谱图。非常适合与气相色谱、液相色谱联用，但质量范围有限，目前最大到4000u。

三角程序滴定法 triangle -programmed titration 由 G. Nagy 和 E. Pungor 首先提出。在流动体系的滴定中，加入滴定剂的量随时间而线性增加，然后按同样速度减小，因曲线形状类似于三角形而得名。滴定时间和被滴定物质浓度成正比，此法已用于库仑滴定。

三棱镜 three prisms 三棱镜是最普通的分光棱镜，折射顶角一般取60°左右。如果采用石英制造，必须消除双折射和旋光性的影响。为此，石英三棱镜常由两块旋向不同的顶角为30°的棱镜胶合而成，并且要求石英晶轴在棱镜主截面内平行于底边。这种石英三棱镜，称为考纽（Cornu）棱镜。

三磷酸腺苷 adenosine triphosphate；ATP 即腺嘌呤核苷-5-三磷酸。是体内能量的普遍流通形式。分子中含有两个高能磷酸键，末端高能磷酸键水解时产生 ADP + Pi，释放能量 $36800J\cdot mol^{-1}$；另一个高能磷酸键水解产生 AMP + Pi，释放能量 $406000J\cdot mol^{-1}$。是体内一切活动能量的直接供应者，ATP 的能量可提供肌肉收缩、生物分子的合成、分子转

运和离子的抗浓度梯度的转移，广泛参与许多磷酸化的反应。

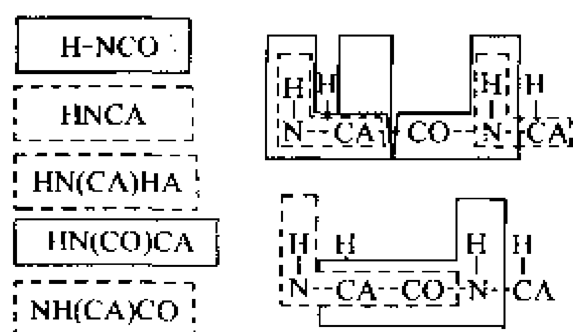
三羧酸循环 tricarboxylic acid cycle 糖、脂肪、蛋白质等在生物体中分解代谢彻底氧化的共同终途径。由化学家 Krebs 发现。丙酮酸经过氧化脱羧基后生成乙酰辅酶 A，后者与草酸乙酸缩合后生成柠檬酸，再经过一系列酶促反应，而分解氧化重新生成草酸乙酸，形成一个循环。每循环一次一分子乙酰辅酶 A 提供的二碳化合物在草酸乙酸分子中经过置换而完全被氧化为 CO_2 和 H_2O，同时放出大量的能。由于含有三个羧基的酸（柠檬酸）在该循环中占重要地位，故名三羧酸循环，又称为柠檬酸循环，亦称为 Krebs 循环。

三透镜照明 three-lens illumination 是一种中间成像的照明系统。它可以使光源某一部分发出的光线均匀地照明狭缝，并获得强度分布均匀的谱线，是目前比较完善的一种照明系统。第一透镜将光源成像于第二透镜前的中间光阑上，再由狭缝前的第三透镜将第二透镜成像于准直物镜上。第二透镜可以消除狭缝前的渐晕现象，第三透镜可以消除仪器内的渐晕现象。在三透镜系统中，各透镜之间的相对距离确定后，就可以求出透镜的焦距。

三维核磁共振 three dimensional nuclear magnetic resonance; 3D-NMR 将一维实验连续插入两组演化期和混合期，每一个演化期内皆引入一个时间变量，依次为 t_1 与 t_2 在检测期 t_3 获得 FID 信号，分别顺序每次改变 t_1、t_2，记录两组 FID 信号，对它们进行三维时域（分别对 t_3，t_2，t_1）的傅里叶变换，获得的是三维 NMR 谱。3D-NMR 谱用空间点阵来表示谱峰。三维核磁共振谱可分为两大类：同核 3D-NMR 谱是针对 ^{1}H 的，有 3D NOESY-NOESY（核欧沃豪斯效应相关-核欧沃豪斯效应相关总相关谱），3D TOCSY-NOESY（总相关-核欧沃豪斯效应相关谱），3D TOCSY-TOCSY（总相关-总相关谱）等；异核 3D-NMR 谱除 ^{1}H 核外常涉及到其他核 X（主要是 ^{13}C、^{15}N 等核），有 ^{1}H—X NOESY-HMQC（核欧沃豪斯效应相关-检出 ^{1}H 的异核多量子相干谱）；^{1}H—X TOCSY-HMQC（异核总相关-检出 ^{1}H 的异核多量子相干谱），^{1}H—X NOESY-HSQC（核欧沃豪斯效应相关-检出 ^{1}H 的异核单量子相干谱），^{1}H—X TOCSY-HSQC（异核总相关-检出 ^{1}H 的异核单量子相干谱）等。目前 3D-NMR 大量应用于生物分子的结构分析，如指认蛋白质分子氨基酸残基的序列及其在溶液中的 2 级结构，应用于谱峰密集的寡糖、聚糖分子的结构分析等。

三维 HNCA 谱 3D-HNCA 见**3D-HNCO** 条。

三维 HNCO 谱 3D-HNCO 在专门为分析蛋白质分子中各种结构单元 HNCO，HNCA，HN(CA)HA，HN(CO)CA，HN(CA)CO 等结构信息而设计的脉冲序列下所获得的三维 NMR 谱。这些结构单元如下页图所示。



其中的 A 是指 α-位置。它们的脉冲序列分别为 3D-HNCO、3D-HNCA、3D-HN(CA)HA、3D-HN(CO)CA、3D-HN(CA)CO 等。

三维 NMR 谱峰分类 peak notation in three dimensional spectra 同核三维 NMR 谱中 $F_1(\omega_1)$、$F_2(\omega_2)$、$F_3(\omega_3)$ 域相同坐标及相同范围表示为正立方体图。根据谱峰在空间的位置的不同可分为 5 种峰：对角线峰（diagonal peaks）处于 $\omega_1=\omega_2=\omega_3$ 的位置；交叉峰（cross peaks）处于 $\omega_1\neq\omega_2\neq\omega_3$ 的位置；交叉-对角峰则处于交叉-对角线平面（cross diagonal plane）内，它有（$\omega_1=\omega_2\neq\omega_3$）以及（$\omega_2=\omega_3\neq\omega_1$）两种情况；回传峰处于回传平面（back transfer plane）（$\omega_1=\omega_3\neq\omega_2$）内。

三线态 triplet state 多电子体系多重状态中的一种，自旋角动量 S 为 1 的状态称为三线态，三线态时电子自旋不配对。如碳原子 2p 轨道上的两个未成对的电子配置（^3P）就是以三线态为基态的状态。分子中的三线态常为激发态，也有像氧分子那样的基态三线态。处于三线态的分子内未成对电子的分布由零磁场分裂常数 D 和 E 的大小来描述。三线态能级在无外加磁场时分裂很少，在强磁场作用下使之分裂可以通过顺磁共振进行研究。由激发三线态回到基态的发光称为磷光。

三相萃取 three-phase extraction 一种特殊的萃取方法。某些萃取体系达平衡后，出现两个有机相和一个水相。例如，当含有二安替比林甲烷的苯和氯仿的 7：3 混合溶液与含 Bi、Cd、Hf、Hg、Sc、Sn 和 Zr 等金属离子的水溶液混合，振荡静置达平衡后，出现三个相：顶层为水相，中间层为主有机相，底层为含有 95% ~ 98% 金属元素的小体积有机相。第三相可直接转移到碳电极，用原子发射光谱法测定这些元素，省去了耗时的蒸发和灰化过程。

三斜晶系 triclinic system 对称性最低的一种晶系，晶体所属点群不具有任何对称轴或对称面。三斜晶系的晶胞参数之间的关系为 $a\neq b\neq c$，$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90°$，选取晶胞时应注意使晶胞体积最小，且三个晶轴之间的夹角均为锐角，或均为钝角。三斜晶系只有一种可能的布拉维格子——三斜简单格子。

散点图 scatter diagram 在回归分析中，试验点散布在直角坐标平面上的分布图。根据试验点的分布趋势，选择合适的函数对试验点进行拟合，以图形方式描述因变量 y 对自变量 x 的相关关系。

散射分析 scattering light analysis 光在传播过程中受到物质散射而形成

散射光，其本质是光与物质的相互作用。因此，散射光的强度、方向、偏振状态、散射光的光谱特性等等都直接反映了引起光散射的物质宏观、微观特性。散射分析就是利用适当的光学手段检测物质引起的散射光各种光学参数，从而推算出有关物质的宏观（如表面粗糙度、光泽度等）或微观（如散射微粒形状、尺寸、散射物质成分、结构、分子结构等）分析信息，获得物质定性、定量或结构分析结果。

散射分析仪器 instruments for scattering analysis 用于对散射光进行观测、分析的仪器。根据分析用途不同，已有许多种通用或专用的散射分析仪器。例如用于检测纸张光泽的光泽度计，用于检测水、饮料、药水浑浊度的比浊计、散射浊度计，用于对微细粉末材料微观尺寸检测的激光散射粒度仪等等。在粉末陶瓷、冶金、水泥、化工、制药等等大工业的材料和产品检测、分级，尤其目前纳米材料、纳米机械新技术等等领域，散射分析仪器是极有效的分析检测手段。

散射光频率的位移 frequency shift of scattering 由于散射质点的热布朗运动，导致熵的涨落而引起散射光频率的微小移动的现象。由于多普勒效应，当光源相对处于静止参考系中的接收器来说，如果散射质点运动方向背离接收器，则接收器接收到的光波频率较静止质点散射光的频率低，反之，如果散射质点运动方向向着接收器，则接收器接收到的光波频率较静止质点散射光的频率高，即发生了相对于入射光频率的频移。朝向或背向接收器以最高速度运动的质点显示出最大的多普勒频移，垂直于接收器方向运动的质点没有频移，其余方向运动的质点产生中等程度的频移，接收器接收到了不同频率的光。

散射函数 scattering function 描述大粒子对散射强度影响的函数，以 $P(\theta)$ 表示。它恒等于大粒子的散射强度与无干涉时的散射强度之比，随 θ 角的增大而减小。当 $\theta=0°$ 时，$P(\theta)=1$，粒子尺寸的影响消失，此时，小粒子的光散射方程全部适用。

散射角 scattering angle 光的入射方向与观察方向的夹角。

散射截面 Scattering cross section 表示物质散射能力的参数，记为 σ_c。它与相干散射长度 b 的关系为 $\sigma_c=4\pi b^2$。

散射强度 scattering intensity 散射光强度的简称。它正比于散射元分子量 M 及折射率增量 dn/dc 的平方。

$$\frac{I_s}{I_0}=\frac{4\pi^2M^2\sin^2\theta_1(dn/dc)^2}{N^2\lambda^4r^2}$$

式中，I_0 为入射光强；I_s 为散射光强；r 为空间任意一点到原点的矢径；θ_1 为矢径与铅垂方向的夹角；λ 是散射介质中的波长；N 为阿佛加德罗常数。

散射矢量 scattering vector 为入射光和散射光的波矢量之差，其模 K 恒等于下式：$K=\frac{4\pi}{\lambda}\sin\frac{\theta}{2}$，式中，$\lambda$

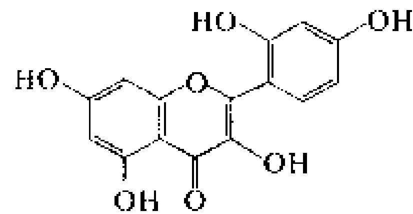
是散射介质中的波长；θ 为散射角。当介质和光源确定后；K 只与散射角有关。

散射中心成分 central scattering component 由于质点运动有快有慢，形成以入射光频率为中心的频率位移不大的一个分布范围，此范围即为散射中心成分，一般在 $1 \sim 10^6$ Hz。参见**散射光频率的位移**条。

散射浊度仪 nephelometer 用来检测自来水、饮料、医用药水浑浊度的分析仪器。与比浊计不同之处是：散射浊度仪在前方或侧方直接检测被试样散射的光强度（前向散射光强、90°散射光强），而不是测定因发生散射而造成的入射光强度的减小值，因此检测灵敏度高、可靠性高，可用于对清澄试样的微弱浑浊度检测。配备激光光源的激光散射浊度仪可用于生物化学反应检测，如抗体-抗原结合形成生物大分子的过程及结果，已应用于癌症探测及治疗效果分析。

桑德尔指数 Sandell Index 简记为 s，一种表示分光光度法显色反应灵敏度的参数。它与另一表示分光光度法灵敏度的参数——摩尔吸收系数 ε 的关系为 $s = F/\varepsilon$，式中 F 表示待测物质的式量。参见**灵敏度指数**条。

桑色素 morin 分子式 $C_{15}H_{10}O_7$，分子量 302.24。熔点为 288℃，淡黄色结晶。在桑科植物材中一般以游离状态存在。也可从豆科植物中分离。可与很多金属反应并发荧光，因此常作为分析用荧光试剂。也可用作织物的染料。可溶于醇、醚、醋酸，溶于碱后逐渐变为褐色。



扫描电化学显微镜 scanning electrochemical microscopy 由 Bard 等人于 1989 年研制成功。它所测量的信号是法拉第电流，是针尖和试样表面电活性物质的速度和化学反应速度的函数，因而所测定的信号与针尖和试样表面的传质和化学反应有关，能用于表征导体、绝缘体和半导体的表面形貌，是适用于对电极表面性质和电极过程动力学研究的一种化学显微镜。

扫描电子束 scanning electron beam 在扫描电镜中用来激发特征 X 射线的聚焦很细的电子束。它在电子束扫描系统的作用下，对样品的表面由点到线，由线到面的逐次进行扫描，以获得物体表面微区的形态信息。

扫描电子显微镜 scanning electron microscope；SEM 一种分析物体表面形态的分析手段。其原理是用聚焦电子束袭击样品，以获取次级电子、背散射电子、透射电子、样品电流、束感生电流、特征 X 射线、俄歇电子以及不同能量的光子的信号，采用其成像电子信号，特别是次级电子信号，来获取物质表面形态的信息。是帮助我们分析和观察物质表面化学、

物理性质及微观结构特征的有力工具。

扫描隧道谱 scanning tunneling spectroscopy; STS 保持隧道间隙恒定，同时对隧道接加一斜坡电压，则隧道电流作为偏压的函数可以提供一种电子结构的信息。是针尖与样品两者电子态密度（DOS）的卷积。隧道谱提供的是针尖 DOS 的信息或者说是针尖的电子结构。

扫描隧道显微镜 scanning tunneling microprobe; STM 一种可以从原子尺度上了解物质表面结构的装置。其基本原理是用一个原子级的针尖在离样品表面约 1 nm 的地方进行扫描，测定其隧道电流就可以得到显微图像。其优点是不用任何电子光学系统，可以得到很高的放大率而没有像差，而且结构也比电子显微镜要简单得多。但要求样品具有较好的导电性以及规整的晶体结构。

扫描透射电子显微镜 scan transmission electron microscope; STEM 指具有扫描附件的透射电镜。利用扫描透射电镜可以观察较厚的样品和低衬度的样品，还可以进行微区分析。

扫描线圈 scan coil 扫描电镜中使电子束在样品表面扫描的部分。通常为两组小的电磁线圈，通上随时间而线性改变强度的锯齿波电流，使得电子束由点到线，由线到面的逐次扫描样品。

色差 chromatic aberration 在不同的学科中有不同的含义。在光谱中，指复合光的光束通过透镜时，由于透镜对不同波长的光具有不同的焦距，因而透镜主轴上的物点成像后，在光轴上的不同位置上获得不同颜色的点像。这种像差称为色差。色差的存在，会使准直物镜对不同波长的光线准直效果不同，因而引起棱镜的附加像散；它也会使聚焦物镜对不同波长的光线的焦距不同，因而造成光谱焦面的倾斜和弯曲。为了减小或消除色差，可以用复合透镜或凹面反射镜。对于不消除色差的光学系统，也可采用把感光片倾斜和弯曲的办法来解决。

在电子显微镜法分析中，色差是指由于电子束与样品相互作用后会产生部分非弹性碰撞以及加速电压的不稳定，均可以使得电子能量有一定的差异。最后聚焦成像电子束的能量很难保证单色性。由于电子的能量不同，从而波长也不一致。则电子透镜的焦距随电子能量而改变，因此能量不同的电子将沿不同的轨迹运动，在物平面上产生漫散的圆斑。

色度 colourity 在规定条件下，油品颜色最接近于某一号标准色板（色液）的颜色时所测得的结果。油品颜色的深浅，同胶质含量有直接关系。因此可以从色度的好坏来判断油品的精制深度、蒸馏的操作情况以及混油污染情况。根据标准色板的规定不同有 ASTM（美国材料与试验学会）色度、赛波特（Saybolt）色度和罗维邦（Lovibond）色度等，测定结果报告应注明相应的色度标准。

色度分析 colorimetrical analysis

色度分析是利用色度学原理和颜色测量仪器检测光源色或被外部光源照明的物体色，给出试样颜色的三刺激值和色品坐标，或测出两种物体色的色差值，从而推得颜色或与颜色相关的其他物理、化学分析结论。

色度学 colorimetry 色度学是研究颜色的感觉、计算、测量和判别的学科。色度学是涉及物理、生理、心理等多门学科的边缘交叉学科。人眼的色觉是对来自物体的不同波长、不同强度光产生的不同（选择性）反应。在色度学中，任何一种颜色 C^* 可用 R（红）、G（绿）、B（蓝）三原色以适当比例相加匹配而得，即 $C^* = R(\mathrm{R}) + G(\mathrm{G}) + B(\mathrm{B})$。式中的 R、G、B 为与被测色 C^* 相匹配时所需要的三原色的（人眼）刺激值，而 $r = \frac{R}{R+G+B}$、$g = \frac{G}{R+G+B}$ 和 $b = \frac{B}{R+G+B}$ 三个比值则称为颜色 C^* 的色品坐标。由于 $r+g+b=1$，所以可在两维平面上画出色品图（例如 r-g 图）。国际照明学会 CIE 对色度学的研究、计算、测量提出了全套公式、表格、标准，成为色度学理论和应用的基础。

色母粒 color masterbatch 塑料色母粒是一种高浓缩、高效能的颜色配制品，即颜料以超常浓度均匀分散在载体树脂中，并形成一定粒径的颗粒。它主要由核心层（颜料）、偶联层（偶联剂或表面活性剂）、分散层（润滑剂或分散剂）、增混层（载体树脂）等组成。载体树脂主要有 PE、PS、APP 等。普通色母粒的标准为：色母粒尺寸为 ϕ3mm × 3mm 或 ϕ4mm × 5mm 圆柱体；熔体流动速率不小于 2g/10min；色母粒中颜料细度为5～20μm；色母粒中颜料分散均匀，塑化好，不允许有连粒，表面光洁、色泽鲜艳；色母粒中颜料含量不低于标准色板的 20 倍。用塑料色母粒染色，比传统的色粉染色科学、先进、实用、效果理想。鉴定一种有色胶粒是否为色母粒时，首先对其外观、熔体流动速率进行鉴定，看其是否符合要求，其次鉴定载体树脂和颜料等的成分，再次，如颜料为无机物时，可用明火燃烧，测定残留物的含量。其中最关键的是查看其生产工艺，看生产工艺中该有色胶粒使用量的大小。如果在工艺中不使用其他有色胶粒致色，且该有色胶粒使用量较小（一般不超过 5%），则可认为该有色胶粒为色母粒。如果生产工艺中，直接用该有色胶粒注塑，或该有色胶粒使用量很大且同时用其他有色胶粒致色，则该有色胶粒为蕴色胶粒，不是色母粒。

色谱电化学法 chromatogram electrochemical method 把液相色谱的高分辨率和电化学检测的高灵敏性相结合的方法。是目前多组分复杂样品的痕量分析的一个重要手段。

色谱法 chromatography 又称色层法、层析法。是一种对混合物进行分离、分析的方法。1903 年俄国植物学家 Tswett 在分离植物色素时，得

到了各种不同颜色的谱带，故得名色谱法。以后此法虽逐渐应用于无色物质的分离，但“色谱”一词仍被人们沿用至今。色谱法的原理是基于混合物中各组分在两相（一相是固定的称为固定相、另一相是流动的称为流动相）中溶解、解析、吸附、脱附、或其他作用力的差异，当两相作相对运动时，使各组分在两相中反复多次受到上述各作用力作用而得到互相分离。

色谱峰 chromatographic peak 被分离的某组分经检测器检测后，其相应的检测信号随载气流出体积（或时间）变化的曲线，理想的应为对称的高斯分布曲线。实际上由于各种原因，很难得到对称的色谱峰。参见**保留时间**条。

色谱峰区域宽度 peak width 表示色谱流出曲线宽度的一个参数。它直接反映了色谱操作条件的动力学因素，也即与溶质在流动相和固定相之间的传质阻力有关，因此，色谱峰区域宽度是度量操作变数的一个重要指标。流出曲线的区域宽度越窄，对色谱分离越有利。度量色谱峰区域宽度的常用方法有：标准偏差 σ 法；半峰宽法；基线宽度法。参见**标准偏差**条，**半峰宽**条，**基线宽度**条。

色谱峰容量 peak content of chromatography 表征色谱分离过程效率的参数之一，是指在给定体系中给定时间（或流动相体积）内，达到的可分辨的（$R_s \geq 1$）溶质峰的数目。色谱峰容量越大，分离效率越高。

色谱富集进样 sample enrichment injection of chromatography 在毛细管进样端连接充有色谱填料的填充床，电迁移进样后充入缓冲溶液，用电迁移洗脱法洗脱至分离毛细管中，按正常方式进行毛细管电泳分离。

色谱工作站 chromatographic working station 又称色谱数据处理系统（data processing system）。对色谱分析过程进行在线显示，自动采集、处理、打印和储存分析数据并能控制仪器各单元部件的部分。它主要由计算机、色谱软件和打印机组成。

色谱检测器 chromatography detector 又称鉴定器。它是检测色谱分离组分物理、化学性质或含量变化（多数情况是将其转化为相应的电压、电流等信号）的一种仪器装置。它是色谱系统中的关键部件，色谱分离过程的“眼睛”。对检测器的要求是：灵敏度高、线性范围宽，重现性好，稳定性好、响应速度快，对不同物质的响应有规律性及可预测性。检测器通常分为积分型和微分型两类。

色谱图 chromatogram 色谱图是指被分离组分的检测信号随时间分布的图像。色谱图形状随色谱方法和检测记录的方式不同而不同，迎头色谱和顶替色谱的色谱图为一系列台阶；在洗脱法色谱中，若采用微分型检测器时，分离组分的检测信号随时间变化的图形为近似于高斯分布的一组色谱峰群。色谱图的纵坐标为检测器的响应信号，横坐标为时间、体积或距离。参见**保留时间**条。

色谱仪 chromatograph 进行色谱分离分析和制备的仪器。它是由流动相输送系统、进样器、分离柱、检测器和数据处理系统（色谱工作站）等5个基本部分和相关辅助部件构成的一个色谱分离分析体系。根据色谱方法的差异可分为气相色谱仪、液相色谱仪、离子色谱仪、超临界色谱仪和毛细管电泳仪等等；根据用途的不同可分为分析型色谱仪、制备色谱仪和工业色谱仪等等。

色谱-原子吸收光谱仪器联用技术 chromatography-atomic absorption spectrometry 将色谱分离和原子吸收光谱检测结合起来的一种分析技术。1966年考尔伯（B. Kolb）首次实现了气相色谱-火焰原子吸收光谱联用，用该技术测定了石油中的四烷基铅。它综合了色谱高效、快速分离和原子吸收光谱高选择性、高灵敏检测的优点，是分析元素化学形态的有效手段。现已有气相色谱、高效液相色谱、离子色谱与火焰原子吸收光谱、石墨炉原子吸收光谱、石英炉原子吸收光谱各种联用形式。实现两者联用的关键是研制性能优良的接口装置和开发多参数的优化技术。它在环境科学、生物医药等领域已经获得了广泛的应用。

色谱纸 chromatographic paper 是指在纸色谱法中作为固定相用的纸。它是由很纯的纤维素或改性后的纤维素制成，其组成大约为98%～99%的α纤维素，0.3%～1.0%的β纤维素和0.4%～0.8%的戊聚糖。色谱纸具有毛细上升能力，当作为流动相的展开剂通过纸纤维间毛细管时有一定的渗透速度并能迁移一定的距离。毛细上升速度取决于纸纤维网络的密度和强度，色谱纸越密，渗透性越差，毛细上升能力就越低，反之则上升能力较高。

色谱柱 chromatographic column 色谱仪的“心脏”部件，它由一段可长可短的玻璃、不锈钢、熔融石英或其他材质的直径不同的管子，管中装填色谱固定相（填料）或将固定液直接涂敷于管的内壁上所制成。混合物样品的分离主要是发生在色谱柱中。色谱柱主要有两大类型，一类是装有填料的色谱柱称为填充柱，另一类为无填料者称开口管柱。色谱柱的分离效能取决于固定相、制柱技术和色谱操作条件。

色谱柱切换技术 switching column technique 将两根（或多根）色谱柱与检测器等部件组合起来对复杂样品进行分析的一种技术。柱的切换是通过连接两柱的阀门或压力管等部件来完成。它可以解决用单一色谱柱不能解决的困难，如样品中某些组分有不可逆吸附或流出时间过长、部分组分分离不佳或难以定性，痕量组分被溶剂或主组分干扰等。根据样品的情况确定两柱（多柱）的组合连接方式、切割功能、反吹功能以及切换时间等。

色散棱镜 dispersion prism 色散棱镜是棱镜光谱仪中的核心光学元件，其任务是将混合色光按波长

（波数）顺序在空间分离开。色散棱镜的工作原理是透明介质对不同波长（波数）的光具有不同的折射率。一束以同样入射角投射到色散棱镜的混合复色光$\Sigma\lambda_i$，经色散棱镜两个折射面连续折射时，不同波长的光因折射率不同而经受棱镜面的不同程度折射，因而从棱镜射出时各种不同波长的光将以不同的出射角射出，实现了空间分离。色散棱镜的色散能力与棱镜材料的色散率$\frac{dn}{d\lambda}$、棱镜的顶角α直接相关。

色散力 dispersion interaction force 色散力是分子间相互作用力的一种形式。假定两个分子X、Y处于相邻位置时，它们的外层电子处于不停的运动状态。由于分子X的电子的随机运动，在某时刻t，电子在核周围位置不对称，在X分子中产生了瞬时偶极。这种瞬时偶极在相邻分子Y中也诱导出一个相应的偶极，它们因静电作用而相互吸引。这种相互作用就是色散相互作用。伦敦推导了这种力的理论公式，即两个相距r的球形分子X、Y之间的色散相互作用势能等于

$$U_{XY} = -\frac{3}{2}\cdot\frac{\alpha_X\alpha_Y}{r^6}\cdot\frac{I_X I_Y}{I_X + I_Y}$$

此公式与光色散公式相似，因此就把这种力称为色散力。式中，I_X、I_Y分别为分子X和Y的第一电离势；α_X、α_Y分别为它们的极化率。一般分子的电离势相差不大，在880～1100 kJ·mol^{-1}范围内。所以色散力主要决定于分子的极化率α。色散相互作用存在于各类化合物中，非极性分子间相互作用主要是色散力。

色散率 dispersion 色散率是物质对不同波长（在可见区呈现不同颜色）的光折射能力的指标。各种透明材料的折射率是波长的函数，因此对不同波长具有不同的偏折能力，通常以$\frac{dn}{d\lambda}$即n-λ曲线的斜率表达在某个波长附近材料折射率随波长的变化程度，因而称$\frac{dn}{d\lambda}$为材料色散率。在光谱仪器中，色散率是一个包含角色散率和线色散率两个概念的统称：不同波长的光经色散棱镜折射后的偏折角变化与波长变化的关系$\frac{d\theta}{d\lambda}$，或经衍射光栅色散后衍射角变化与波长变化之间的关系$\frac{d\beta}{d\lambda}$，都称为角色散率；在光谱聚焦成像面上，不同波长形成的谱线位置变化与波长变化之间的关系$\frac{ds}{d\lambda}$，则称为线色散率。在实际分析工作中，还有人将线色散率的倒数（倒数线色散率）$\frac{d\lambda}{ds}$笼统叫做色散率。因此，在不同情况下应准确地辨别“色散率”的含义。

色散系统 dispersive system 由一个或数个色散元件组成，由准直光路射出的平行光束，经过色散元件之后获得色散。色散之后，不同波长的光以不同的角度进入成像系统的聚焦光路。所以，色散系统是光谱仪的核

心，是获得光谱的关键。在原子吸收及原子荧光光谱中，色散系统对分辨能力要求不高，但要求有较大的集光本领，常用的色散元件是光栅。在高温光源的原子发射光谱中，色散系统要求高的分辨能力以降低干扰，故出现焦距 3.4m 的大型光栅光谱仪及 4300 线 · mm^{-1}的分光系统。

色散信号 signal of dispersion 当体系的居里磁化率χ_0、共振频率ω_0、自旋-晶格弛豫时间T_1、自旋-自旋弛豫时间T_2、B_1皆已知，在旋转坐标系中 Bloch 方程的解中的两个分量u，ν可写为

$$u=\frac{a(\omega_0-\omega)}{[1+(\omega_0-\omega)^2T_2^2+b]}$$

$$\nu=\frac{a}{T_2}[1+(\omega_0-\omega)^2T_2^2+b]$$

式中，a、b是常数。当以x'（或u）或y'（或ν）为纵坐标，以ω为横坐标作图，可清楚地看到u、ν是B_1（以频率计）的频率的函数。当ω由小而大逐渐通过ω_0时，u可被描述为当$\omega=\omega_0$时其值为零的反对称于u轴的曲线，这与光折射时光强对频率关系的所谓色散的行为相似，因此在x'轴获取的这种 NMR 信号称为色散信号，而ν可描述为当$\omega=\omega_0$时为一极大值，且对称于ν轴的曲线图像，它与普通的吸收峰形一样，因此所获取的信号称为吸收信号。

色散元件 dispersive element 光谱仪中起分光作用的元件。常采用棱镜或光栅。

色素还原法 pigment reduction method 一种快速检测牛乳新鲜度的方法。当细菌在牛乳中繁殖时，需消耗氧，于是牛乳中的氧化-还原电势下降，加入在乳中的氧化-还原指示剂（色素）的颜色发生变化，借此来判定微生物的活动情况，从而确定乳的质量等级。最常使用的方法是刃天青试验和美兰试验。

色坐标 color coordinates or colorimetrical coordinates 严格说应称为色度坐标。为了研究、计算、测量和评判颜色，国际照明学会绘制出一张标准的色度图（称为 CIE1931 色度图），是以x、y两个色度坐标轴绘出的平面图形，其中绘出人眼对三原色刺激响应的光谱轨迹。这张图中包容了一切物理上能实现的颜色，任何一种颜色都在色度图中占一确定的点位置，这位置可用此点相应的x值和y值惟一确定。确定任一颜色在色度图上位置的x、y值，就称为这种颜色的色度坐标。

沙哈方程 Saha equation 沙哈方程是沙哈为天文学家从事电离层研究中给出的，计算元素在火焰中电离程度的方程。其表示式为

$$\lg\left(\frac{X^2}{1-X^2}\right)=-\lg P-\frac{5404V_i}{T}+\frac{5\lg T}{2}-B$$

式中，X为电离程度；P为火焰气体的分压；V_i为金属的电离电位（eV）；T为绝对温度（K）；B为常数。沙哈方程不单用于火焰光源中电离度的计算，也用于各种处于热力学

平衡状态的光源的计算。

筛分介质 sieving medium 是一类具有筛分功能的物质的统称。在毛细管电泳中的筛分介质包括凝胶材料和非凝胶材料。前者如交联聚丙烯酰胺，后者如甲基纤维素。

闪点 flashing point 又称闪燃点。液体表面上的蒸汽和空气的混合物与火接触而初次发生蓝色火焰闪光时的温度。是表示可燃性液体性质的指标之一。标准测定仪器有开杯式和闭杯式两种，一般前者用于测定高闪点液体，后者用于测定低闪点液体。闪点温度比着火点低些，可燃性液体的闪点和着火点表明其发生爆炸或火灾的可能性大小，对运输、储存和使用的安全有极大的关系。

闪烁计数器 scintillation counter 又称闪烁探测器。是一种利用荧光效应将放射性辐射转变为可见光而加以检测的装置，由闪烁晶体和光电倍增管组合而成。当入射的放射性辐射被闪烁晶体所吸收时，便产生若干数量的可见光光子，可见光光子再由光电倍增管转变为电信号检测，电信号经放大送入数据处理系统，获得的电信号脉冲的幅度与入射辐射的能量有一定的函数关系。常用的无机闪烁体有Tl激活的碘化钠NaI(Tl)和碘化铯CsI(Tl)晶体，对电子、γ射线、X射线灵敏，发光效率高，能量分辨率较好，光衰减时间较长。有机闪烁体多为芳香族，光衰减时间短，塑料闪烁体光衰减时间可小于1ns，常用于时间测量。气体闪烁体的光衰减时间较短（<10ns），但发光效率不高。

闪耀波长 blaze wavelength 闪耀光栅中辐射能量最大的和衍射主极大的中心波长称为闪耀波长。闪耀波长主要取决于闪耀角的大小。一级闪耀波长为300nm的光栅，第一级光谱闪耀波长范围为200～600nm。质量优良的闪耀光栅可以将约80%的光能量集中到所需要的波长范围内。

闪耀光栅 blazed grating 刻制光栅时，调整刻划刀角度，可使直边锯齿形长边工作面对光栅表面形成一定的夹角ε，就可形成闪耀光栅。对某一波长λ_b，若它在光栅上衍射的衍射光方向正好与它在栅线长边工作面上的反射光方向一致，则这块光栅会对此波长λ_b的入射光形成闪耀，其光强比其他任何波长都强，显得特别“耀目”。闪耀角ε与入射角α、衍射角β的关系式为$\varepsilon=\frac{\alpha+\beta}{2}$。利用闪耀光栅的特性，可以有目的地选择$\varepsilon$角，使它对确定的波长$\lambda_b$（称为闪耀波长）闪耀，一般都将研究或分析工作最关心的波长作为闪耀波长。在闪耀波长两侧，各波长的相对光强逐渐下降，尤其在$\lambda<\lambda_b$的短波侧下降得更快。通常，将相对强度大于等于闪耀波长处最大强度一半值所对应的波长范围，称为闪耀光栅的有用工作波长范围。

闪耀角 blaze angle 闪耀光栅中光栅刻痕的小反射面与光栅平面的夹角称为闪耀角。当入射角和衍射角相等且等于反射面与光栅平面的夹角，

此时在衍射角方向上可得到最大的相对光强。

闪耀特性 blaze speciality 是将光栅刻痕刻成一定的形状（通常是三角形的槽线），使衍射的能量集中到某个衍射角附近。质量优良的光栅可以将约 80% 的辐射能量集中到所需要的波长范围内。

扇形磁式质谱仪 magnetic sector spectrometer 通常指质量分析器由扇形磁场，或磁场和电场组合的单聚焦或双聚焦的质谱仪，是最早发展的质谱仪器。主要特点是质量范围较宽（可达到几万质量单位），分辨率高（十几万的分辨率），谱图重复性好。缺点是运行速度不够快，体积大。

商品检验 commodity inspection 具有法定资格并独立于贸易关系人的第三者，对交易商品的质量、规格、数量、重量、包装以及是否符合安全和卫生的要求进行检验鉴定，以确定或证明该商品是否符合法律法规规定、合同标准或交易条件。

上行展开法 ascending development method 在纸色谱法或薄层色谱法中，当点样后在展开槽中进行展开时，若展开剂载带样品斑点移动的方式是自下而上，即色谱斑点呈自下而上地分布时，称此种展开方式为上行展开法。

烧结玻璃坩埚 sintered glass crucibles 一种过滤沉淀物的玻璃制过滤器。结构参见**古氏坩埚**条，该坩埚有一烧结玻璃底，该底可做成细的、中等和粗的孔径（国内用 G1 ~ G4 表示，数字愈大、孔径愈细）以适应不同的需要。这类坩埚除可用于抽滤沉淀外，最主要的优点是可直接用于沉淀物无需高温灼烧，只需在恒温烘箱中恒重的重量法分析中。

蛇笼（状）树脂 snake cage resin 在离子交换树脂内部封入了与树脂的固定离子带相反电荷的高分子反离子的树脂。以纯水作流动相时的溶质洗脱顺序是非电解质先流出，电解质后流出，这正好与离子排斥色谱相反。

舍入误差 round-off error 对位数较多的数，为计算方便或受到计算工具的限制，用位数较少的数来代替，或由于对数字进行修约而引入的误差。舍、入数字的原则，现在采用“四舍六入五单双”的修约规则。参见**修约规则**条。

射频场 radio-frequency field 电磁波可按频率分段，频率在 10^9 Hz 之内的波段为无线电波，其中的短波区常称为射频波。核磁共振频率处于射频波段，因为核自旋只与电磁波中的交变磁场发生相互作用，所以将激励核体系发生共振的电磁波称为射频磁场或射频场。电磁波是横波。核磁共振中所讨论的激励电磁波是平面线偏振波（场）。强度为 $2\boldsymbol{B}_1$ 角频率为 ω，初始相位角为 ϕ 的线偏振磁场 $\boldsymbol{B}_\phi$ 的通式为 $\boldsymbol{B}_\phi = 2B_1\cos(\omega t + \phi)$ 。核磁共振中习惯上总是将射频场的发射线圈的位置（x 轴）置于垂直于外加静磁场（z 轴）方向，则 $\phi = 0°$、$90°$、$180°$，$270°$，在脉冲傅里叶变换核磁共振中对所施加的射频脉冲的右下角

加注的 x, y, $-x$, $-y$ 分别表明初始相位角为 0°, 90°, 180° 与 270°, 相当于在 x, y, $-x$, $-y$ 轴上施加射频脉冲。如 90°x 表示沿着 x 轴初始相位角为 0°，强度为使核作 90°倾倒的射频脉冲，或者沿着 $-x$ 轴施加 -90°倾倒角的射频脉冲。任何平面线偏振场总可分解为两个反向的圆偏振场：$\boldsymbol{B}_\phi = 2B_1\cos(\omega t + \phi) = \boldsymbol{B}_1 e^{-(i\omega t+\phi)} + \boldsymbol{B}_1 e^{i\omega t+\phi}$，右边第一项为右旋圆偏振场，第二项为左旋的圆偏振场。对于磁旋比 γ 为正的核，其拉摩进动为左旋的，而 γ 为负的核，则是右旋的。当射频场频率与核的拉摩频率相等时，$\omega = \omega_0 = \gamma \boldsymbol{B}_0$ 便发生核磁共振。对于 γ 为正的核，只有左旋圆偏振场与它同步，而右旋圆偏振场与核的进动方向相反，不同步，因此这半支偏振场常常被略去。反之亦然。只有当射频场很强时，应予考虑，因它将引起Bloch-Siegert 位移。

射频放电检测器　radiofrequency discharge detector　气相色谱中使用的一种放电检测器。其结构系由一金属圆筒和筒中央的一根金属丝所组成。在圆筒和丝之间施加射频交变电压（20～40MHz，2000V）时，圆筒内气体即放电，使圆筒与丝之间有直流电通过（电压约为 60V）。当流过圆筒的载气中出现样品组分时，此直流电压就发生变化而输出信号。

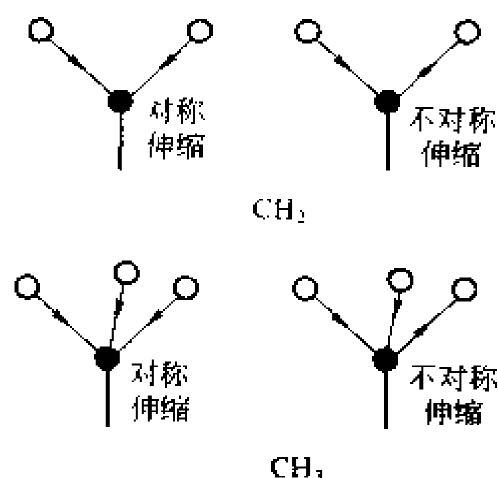
射频火花（离子）源　radio frequency spark source　简称火花源。无机质谱仪的一种常用离子源。由装有一对电极的真空室构成。通常一个电极是用被分析物质做成样品电极，另一个电极为参考电极。在相距很近的两个电极间，加上几百 kHz 以上、几十 kV 的高频电压，使两电极间产生电火花放电，从而引起电极物质的蒸发电离。这种方法能使电极物质及存在于电极间隙的气体全都电离，有较高的电离效率。但由于离子初始能量发散严重，一般使用双聚焦分析器，才能得到好的分辨。

射频脉冲相位角　phase angle of radio-frequency pulse　见射频场条。

摄谱法　spectrometry　摄谱法是将激发试样获得的复合光通过入射狭缝射在分光元件上，使之色散成光谱，然后用感光板接受光谱辐射，再用光谱投影仪，光谱比长仪或测微光度计进行谱线观察和测量的方法。摄谱法适用于较宽的光谱区，线性范围也较宽，具有灵敏，准确等特点，常用于多元素同时测定。

伸缩振动　stretching vibration　原子沿连接它们的化学键做周期性的伸和缩的振动，以符号 ν 表示。当两个化学键在同一平面内均等地同时向外或向内伸缩振动，称为对称伸缩振动，以符号 ν_s 表示；若一个化学键向外伸展而另一个化学键向内收缩伸缩振动，称为不对称伸缩振动，以符号 ν_{as} 表示。一般 ν_{as} 比 ν_s 的频率高。只有分子振动有偶极矩改变时才会产生明显的红外吸收峰，高度对称的化学键，如反式二氯乙烯分子的双键，分子振动前后的偶极矩没有改变，此双键没有红外吸收峰。伸缩振动的力

常数比变角振动的要大，同一基团的伸缩振动吸收常出现在高频端。甲基和亚甲基的伸缩振动如下图所示。



砷的价态分析 valence analysis of arsenic 关于砷的不同氧化态的分析技术。砷是古代就已知的一种广泛分布于自然界的元素。作为少有的天然砷（As）其纯度为90%～98%，以游离状态存在。氧化数不同毒性不同，例如 As_2O_3 被认为剧毒，而单质砷可能有益，故其价态分析很有必要。As 重要的氧化数为 -3、+3 和 +5。As(+Ⅲ)在浓的酸性溶液中以 AsO^+ 的形式存在。当酸的浓度降低时，就出现 $HAsO_2$，在碱性溶液中，主要是 AsO_2^-。As(Ⅴ)不存在单独的+5价离子，而只能以 AsO^{3+}、AsO_2^+ 的形式存在。在酸性溶液中是 H_3AsO_4。还有气态的 AsH_3。

深度分辨率 depth resolution 不均匀组成的表面与界面随深度而改变其组成。实测的浓度-深度分布，由于俄歇电子或光电子平均自由程的影响，相对于真实分布有所增宽，经过离子溅射引起表面层形貌及组成的改变进一步加剧了这种增宽效应。假设有一理想的界面，其浓度分布应该是阶梯形，则深度分辨率可定义为：以理想界面为准，在左右两侧的一段深度范围内，俄歇电子或光电子信号强度以一规定量增加或减少。影响深度分辨率的因素很多，主要有仪器、样品特性、离子束辐射引起的效应等。

深孔分馏法 deephole fractionating process 将较多的试样（50～100mg）装入大而深的电极孔穴内，在电弧中稳定地燃烧，由于试样不与弧焰直接接触，而是靠电极的热传导使试样慢慢升温，易挥发元素逐渐地、缓慢地从电极孔穴中蒸发出来，而中等挥发元素和难挥发元素的蒸发受到抑制，随后蒸发出来，利用这种分馏效应，得到的光谱背景较浅，中等挥发元素和难挥发元素谱线很少出现，避免了它们的干扰，可提高易挥发元素的检出限。

神经递质 neurotransmitter 神经冲动达到神经末梢时，从神经末梢释放出的一种化学递质。通过神经递质作用于次一级神经元或效应器（心肌肉、内脏平滑肌、腺体、骨骼肌等），完成神经冲动的全部过程。神经递质分外周神经递质和去甲肾上腺素、乙酰胆碱和中枢神经递质如5-羟色胺、多巴胺等。

渗透 dialysis 一种膜分离过程。两个液相之间被一层半透膜隔开。渗透液中的溶剂（而不是溶质）通过

膜渗透到膜的另一边而溶质留在渗透液中得到浓缩。渗析与渗透不同的是，渗析是溶质（而不是溶剂）透过膜。渗透常常用于稀的大分子溶液中除去水等溶剂。

渗透极限分子量 permeation limit molecular weight 对特定的凝胶色谱柱而言，在该柱上完全不受孔体积的限制，能自由进出填料孔隙的溶质的最大分子量。即小于此分子量的溶质，因都能无束缚地进出填料表面的孔隙，都在相同的淋洗体积（渗透体积）处流出，相互之间无法分离。

渗析 dialysis 又称透析。一种将小分子或离子与大分子（如蛋白质）分离的过程。试样置于半渗透材料（如胶棉、玻璃纸、膀胱膜等）制成的袋子里，并将袋子放入水或适当的试剂溶液中。小分子或离子能通过半透膜的微孔扩散到袋外，直到袋内、外浓度相等，但大分子不能通过而保留在袋内。更换外部溶液多次渗析即可实现分离和纯化大分子的目的。

渗析器 dialyzer 渗析器的结构类似于气体扩散装置。用亲水的渗透膜代替疏水的微孔膜，如醋酸纤维素或硝酸纤维素膜等。由于渗析转移效率较低，渗析槽长度应适当增加。常采用的形状见下图。用于从基体中分离出可渗析的低分子量的待测组分，实现连续的微量过滤。



升温曲线 heating curve 由升温测得的记录曲线。纵坐标为试样温度（T_s），横坐标为程序温度（T）或时间（t）。在热分析中可根据升温曲线来确定物质在发生物理或化学性质变化时的温度。

升温速率 temperature rate 在程序升温色谱操作中，色谱柱温度在单位时间内升高的程度，单位是℃·min^{-1}。为了使柱温与被分离组分的沸程相适应，升温速率的选择既要考虑分离效率，又要考虑分析速度。若升温速率较低，分离度增大，但沸点高的组分保留时间过长且峰变宽；而升温速率较高，虽然分析时间缩短，但柱效及分离度都会降低。对毛细管柱来说，一般选在0.5～10℃·min^{-1}的范围为宜。

升温速率曲线 heating-rate curve 记录加热曲线对时间的微商$\left(\frac{dT}{dt}\right)$与温度（$T$）或时间（$t$）关系的曲线。纵坐标为$\frac{dT}{dt}$，横坐标为$T$或$t$。在热分析中升温速率是一个很重要的实验条件。例如，在热重法中试样的热分解温度与升温速率密切相关，由于升温速率越大，所产生的热滞后现象越大，而导致热分解温度偏高。又如，以2.5℃·min^{-1}的升温速率测定$NiSO_4 \cdot 7H_2O$的热重曲线，只得到一水合物的平台，而0.6℃·min^{-1}升温可检测到六、四、二、一水合物。表明

慢升温速率有利于中间体的鉴别。

生化耗（需）氧量 biochemical oxygen demand；BOD 地面水体中微生物分解有机化合物的过程中消耗水中的溶解氧的量，又称生物需氧量，全称是生物化学需氧量，通常计为BOD。微生物在分解有机物过程中，分解作用的速度和程度同温度和时间有直接关系。为了使测定的BOD数值有可比性，采用在20℃条件下，培养5d后测定溶解氧消耗量作为标准方法，称为五日生化需氧量。

生化需氧量测定 determination of biochemical oxygen demand 采用规范的实验步骤测定废水、出水以及污染水的相对需氧量。此方法测量有机物生化降解所需要的氧（碳及氢的需要）以及氧化无机物质如硫化物、亚铁所用的氧。如未用抑制剂防止氮的氧化，此方法也可测量氧化各种还原形式氮所用的氧（氮的需要）。测定方法分以下几个步骤：将样品装满在气密良好的瓶中，在规定的条件下将此瓶培养规定的一段时间；测量培养开始前和培养结束后的溶解氧（DO）；根据开始和最后的DO之差计算BOD。培养的温度一般控制在（20±1）℃，培养时间为5d，此时测得的结果又称为五天生化需氧量，简记作BOD_5。

生物半衰期 biological half-life 存在于生物体内某特定组织中的放射性同位素，由于生物学的过程，比如通过代谢或排泄就会使之从该组织中排出，通常这种过程是按指数函数发生，也可以与某近似的比例发生。在这种情况下，当放射性同位素降到开始的$\frac{1}{2}$时所需的时间就称为生物半衰期。组织中存在的放射性同位素通过自发造成的，使放射性强度降为开始时的$\frac{1}{2}$时所需的时间叫做有效半衰期（*effective half-life*）。射线对组织的作用是有效半衰期越长作用越大，生物半衰期也可理解为药物/生物物质在体内消除一半所需的时间，生物半衰期可以帮助判断何时达到稳态血药浓度，合理确定给药时间间隔，了解药物停用后一定时间内尚剩留的药量。

生物传感器 biosensor 模拟生物细胞的识别机能，用特定的分子认识机能物质来识别化学物质，并将这种化学信息转变为电信号、光信号的装置。可用于环境监测，临床检验和生化分析等方面。

生物催化电极 biocatalyzing electrode 一种生物电极，例如酶电极、微生物电极。利用生物膜的专一性选择性识别底物，催化底物反应，用电化学电极对产物电化学活性的检测实现对底物的分析。

生物电化学 bioelectrochemistry 利用电化学的原理以及实验技术，从蛋白质、核酸等分子、细胞水平上研究生物分子氧化还原反应机理与其生物生理学意义的关系；揭示生物体系内电子传递与能量代谢、物质代谢之

间，以及与信号储存、传导之间的关系；药物对生物体系的作用；电场、磁场对生物体系的作用等，以及由此而产生的生物电化学技术的研究与应用。是由电生物学、生物物理学、生物化学以及电化学等多门学科交叉形成的一门独立的学科。

生物发光 bioluminescence 发生在生物体系中的化学发光。它是一种普遍存在的自然现象。萤火虫的发光是人们知道的最常见的一种生物发光。海洋中某些鱼类体表发光，是细菌体系的生物发光。这是两种研究得最多的生物发光体系。通常说的生物发光是指肉眼可看到的发光现象，实际上还有肉眼看不到的生物微弱发光和超微弱发光现象。脂类在链式自氧化过程中能发射光子，这是生物发光的一种主要的源泉。生物发光分析灵敏度高，一般可达到 10^{-12} mol 的水平。如果结合免疫分析，形成所谓生物发光免疫分析法。因此近年来生物发光分析已经逐渐应用于生物学和医学方面的研究。

生物发光传感器 bioluminescence sensors 基于生物发光原理，且具备一般传感器特点的传感装置，称为生物发光传感器。

生物功能物质 biological functional materials 具有识别能力的生物分子，如酶、抗原和抗体等，具有很高的选择性。

生物功能物质的固定化 biological functional material immobilization 将具有分子识别能力的生物功能物质，如酶、抗原和抗体等，包藏、吸附或键合于某些高分子材料，生物高分子或无机材料内制备成感应器。

生物耗氧传感器 biological oxygen-consumption sensor 以活性污泥中获得的微生物为敏感成分而制得的传感器。是环境监测中常用的一类传感器，通过对生化耗氧量的测定可以评价水体被有机物污染的程度。

生物机能性发光 biofunctional luminescence 某些生物在进化过程中为适应环境条件在可见光区的发光，是生物在进化过程中保存下来的一种适应环境的机能。它具有照明、通讯、求偶等功能。能发出可见光的生物有发光细菌、真菌、放射虫类、海绵、甲壳类、萤火虫等昆虫和鱼类等。据统计动物界约有半数种群含有发光的类群，其中多数属于海洋生物，尤其是深海动物。这类生物有专门的发光器官，而高等植物、鸟类、哺乳动物发光的现象却比较少见。这些生物的发光虽然微弱，但是在人眼的可见范围内，它们都可发出蓝绿色的光，而且几乎都有荧光素酶参与反应，是一个需氧的过程。这类发光统称为微弱发光。因为它们都有专门的发光器官，与某些生理功能相关，所以也称为机能性发光。

生物利用度 bioavailability 药物制剂中的活性药物被全身利用的程度，包括进入体循环的相对剂量和速度（与一参比制剂相比）。某剂型中药物的生物利用度，数值上等于把该药物在体内最易被利用的形式（通

常为静脉注射剂）当作100%吸收时，该被试验剂型中药物吸收的分数。生物利用度实际上是制剂间或剂型间等效性的指标，如果两个制剂的生物利用度相等，它们就是生物等效的，在临床应用时发挥相同疗效。如生物利用度不同的两制剂，疗效就不同。

生物膜 biomembrane 是指生物体内广泛存在的薄层组织，成分主要是脂类和蛋白质。高等生物膜的主要脂类有磷脂、磷脂酰胆碱、磷脂酰乙醇胺（脑磷脂）、磷脂酰胆碱（卵磷脂）、胆甾醇和鞘磷脂。细胞膜外上的糖蛋白是抗原物质。生物膜由双层脂质构成（即为脂质双层镶嵌流动模型）。膜对水和亲脂性物质可通透，对离子有弱通透性，对极性物质，如糖较难通透，后两类物质可依靠主动转运和载体介导系统透过细胞膜。膜能通过吞噬作用或胞饮作用吸收大分子。膜可作为电绝缘体（如某些神经纤维的肌鞘内），并且是蛋白质合成的调节部位。

生物膜电极 biomembrane electrode 通过吸附、键合、交联或包埋等方式将具有一定生物活性的分子引入电极表面而构置的电极。

生物亲和型传感器 biological affinity sensor 基于底物分子与固定化的敏感成分具有生物亲和作用，两者特异性的结合引起敏感成分分子结构和/或固定介质发生物理化学变化，由此而构置的传感器则称为生物亲和型传感器。

生物色谱 biological chromatography 碳水化合物、蛋白质、酶、肽类、核苷核酸等生物大分子的色谱分离制备技术。与采用常规色谱方法所分离的物质不同，待分离的生物聚合体样品分子量较大、在自然界通常呈离子状态、兼具亲水性和疏水性、易失活、与固定相表面产生非专一性的相互作用。因此，生物色谱所采用的固定相和色谱分离条件需考虑生物样品的特殊性。

生物特异性柱 biospecific column 对生物活性成分具有特殊吸附作用的色谱柱。是将具有生物活性的配位体（如酶、辅酶、抗体、激素等）以共价键结合到不溶性固体基质上制备而成的，蛋白质或生物大分子等生物活性物质因与生物活性配位体之间的特异亲和力而选择地被吸附。在亲和色谱中使用的就是这类色谱柱。

生物体液原态分析 analysis of original organism in body fluid 分析生物体的体液、组织和排泄物等生物体中的环境污染物及其代谢产物的含量，以确定有机体受环境污染的程度和受害的危险性。生物体液标本是根据环境污染物在体内的代谢特点和是否便于采集和分析来选择的，常用的体液有血、尿和唾液等。体液在这种原态分析检测过程中，无需任何预处理。

生物效能 biological efficacy 化学药剂（制剂）作用于生物体的影响和功效。包括两个方面的效应：（1）功能性效能，即该药制剂对生物体应

有的作用；（2）毒副效能，即该药制剂在发挥正常活性，同时伴随的有害的生物效应。

生物氧化还原标准状态 Biological redox standard state 氧化还原电位是一个电子给体（还原剂）提供电子给一个电子受体（氧化剂）的难易的量度，因此，对于一个给定的氧化还原反应，电子流动是从氧化还原电对中具有低的标准氧化还原电位的还原剂到具有较高标准氧化还原电位的氧化剂。pH 为 7 的生物氧化还原体系的普通标准状态就是生物氧化还原标准状态。

生物医学质谱法 biomedical mass spectrometry 用于生物医学领域的质谱分析方法。用于临床医学，又称为临床质谱法（clinical mass spectrometry）。用于生物组成、药物及其代谢物的分析，生化、生理学等基础医学研究，以及疾病的诊断和治疗等。

生物制品 biological product 应用自然的或以基因工程、细胞工程、蛋白质工程、发酵工程等生物技术获得的微生物、细胞及各种动物和人源的组织和液体等生物材料制备的，用于人类疾病的预防、治疗和诊断的药品。生物制品可分为五类：（1）疫苗，细菌类疫苗、病毒类疫苗、联合疫苗等；（2）抗毒素及免疫血清；（3）血液制品，人血白蛋白，人免疫球蛋白；（4）细胞因子，干扰素、白细胞介素；（5）诊断制品，体外诊断制品、体内诊断制品。

生物质谱法 biological mass spectrometry；BMS 特指研究与生物相关物质的质谱分析法。从生命科学的观点研究有机分子，为区别于一般有机质谱分析，在医学上使用生物医学质谱法一词。

生物自显影法 bioautography 即生物与酶检出法。本法适用于抗生素等具生物活性物质的检出。方法是将分离后的薄层与有适当微生物的琼脂培养基表面接触，经过培养后观察抑菌斑点。薄层上的活性酶与同位的农药结合，抑制了底物酶的水解，农药即在深色背景上呈无色斑点。酶检出法常用于农药的检出。

生长激素 growth hormone；GH 由垂体前叶嗜酸性细胞分泌的由 188 个氨基酸残基构成单链激素。具有促进蛋白质生物合成，增加血糖和脂肪酸浓度的作用。它受下丘脑的生长激素释放激素和生长激素释放抑制激素的调控。生长激素分泌过多可引起巨人症（儿童）或肢端肥大型（成人）；分泌不足引起侏儒症。

生长调节素 growth regulating substance growth regulator 指用极微量就能使生物生长发生变化的营养物质和可改变生长形态的物质。例如一般认为植物生长调节物质应该具有像生物体内的生长激素那样固有作用方式，并显现出相应的效果。植物生长激素、抗植物生长激素和上斜生长诱导物质，以及 2,3,5-三碘苯甲酸、香豆素、原五叶银莲花素（anemonin）统可以看做是生长调节物质，既适用于生物体内原来含有的物质，也适用于

实验合成的化合物。

生长因子 growth factor 细菌在生命活动中必须从外界摄取营养物质，主要是水、碳源、氮源、无机盐等。有些细菌尚需若干特殊的物质才能生长，这些物质统称为生长因子，如多种B族维生素，为辅酶或辅基的成分；多种氨基酸为缺乏某些氨基酸合成酶的细菌生长所必需；嘌呤和嘧啶的主要功能是构成核酸和辅酶；此外还有一些特殊的生长因子如X因子和V因子，为流感嗜血杆菌所必需。

生猪β兴奋剂残留检验 β-agonist residues determination of pig β兴奋剂是一类人工合成药物，具有降低家畜脂肪，提高瘦肉率，促进家畜生长，改善肉质的作用。主要的β兴奋剂有克仑特罗（Clenbuterol），盐酸克仑特罗（Clenbuterol · HCl）和沙丁胺（Salbutamol）等。β兴奋剂作为饲料药物添加剂对家畜有影响代谢的副作用，而在家畜中残留的β兴奋剂通过食物链进入人体，对人体产生危害特别是对心脏病病人危害更大。欧盟、美国、加拿大及我国等国家已明文禁止其作为饲料药物添加剂使用。目前，生猪的β兴奋剂监测主要是测量其在肉组织、饲料和尿液的含量。检测方法有气相色谱-质谱联用法（GC-MS）、液相色谱法（HPLC）、液相色谱-质谱联用法（HPLC-MS）、薄层色谱法（TLC）、气相色谱-红外联用法（GC-FTIR）、酶联免疫法（ELISA）和放射免疫法（RIA）等。

声光可调滤光器 acoustooptic tunable filter; AOTF 一种建立在光学各向异性介质的声光衍射原理上的电调谐滤波器。当输入一定频率的射频信号时，AOTF会对入射多色光进行衍射，从中将特定一段中心波长的准单色光在偏离主光轴级光谱一定角度的方向上衍射出来从而达到分光的目的。以AOTF作色散元件的光谱仪与传统的基于机械调谐色散元件相比具有明显的优点：结构简单，无移动部件，体积小，集光能力强，波长调谐过程快速及多模式。AOTF在光谱分析中有广泛的应用：利用AOTF的衍射和快速扫描特性，可以制成各种新型快速扫描装置；利用AOTF的大角孔径和强的集光能力可以制成各种成像光谱仪；AOTF的多谱线的同时输出和同时调制性质，目前已被应用于制造多维光谱仪以进行多组分分析。

声光调谐 acoustooptic tuning 在发生声光效应导致声光衍射时，必须满足动量匹配条件：$\vec{k}_d = \vec{k}_i + \vec{k}$，式中$\vec{k}_d$、$\vec{k}_i$和$\vec{k}$分别为衍射光、入射光的光波矢和声波矢，它们的值分别为

$$k_d = \frac{2\pi n_d}{\lambda_0}、k_i = \frac{2\pi n_i}{\lambda_0}和 k = \frac{2\pi f}{v}$$

式中，n_d、n_i分别是衍射光、入射光的折射率；λ_0是衍射光的真空波长；f是超声驱动频率；v是声波在晶体中的传播速度。因此，对一个固定的声频f，只有确定波长（或极窄波带）的光满足条件而被衍射。改变超声激励频率时，为了维持动量匹配

条件，衍射光波带中的中心波长 λ_0 值必然相应地发生变化，这就是声光调谐。利用声光调谐可制成声光可调谐滤光器（AOTF），作为色散（分光）元件用于光谱分析工作。与传统的分光元件（色散棱镜、衍射光栅）相比，AOTF 有一系列突出优点：能以极高速度实现电调谐（10μs 左右），因而可实现高速光谱扫描；角孔径大、集光能力强、衍射效率高，可直接用于微弱光谱分析；AOTF 器件是固态的，不需要机械运动器件，不但误差小而且可用于特殊场合（如震动、强冲击场合）。此外，因为电调谐工作方式便于与计算机控制连接，实现多功能实时控制。

声光效应 acoustooptic effect 当超声波馈入某些光学各向异性的介质中后，由于光弹效应使介质的折射率发生周期性变化，形成一个"位相光栅"，若光束通过介质（称为声光晶体）时会受到声光衍射，被衍射成向不同方向出射、偏振面正交的线偏振光（o 光和 e 光）。这种现象称为声光效应。

声致发光 sonoluminescence 气体或固体对超声波能量有比较好的吸收能力，而超声波在液体中衰减和吸收是比较弱的。如果想把超声波能量转移给液体中的某些分子或离子，必须先对液体进行空化处理。经空化处理之后，把超声波传播给该溶液，可以出现微弱的发光现象。这种现象称为声致发光。人们对于声致发光现象的研究已有较长的时间，但是由于这种现象的机理是一种极其复杂的过程，虽然有许多这一方面的文章和评论，但对超声能量的转化过程，仍然不很清楚。

湿沉降的测定 determination of wet sedimentation 以任何湿的形式离开大气而到达地表的物质。例如雨（酸雨）、雪、雹、雾等以及其他形式的降水都是湿沉降。通常习惯称之为大气降水。在正常情况下，大气中的二氧化碳浓度约为 316×10^{-6}L/L。纯净的降水在降落过程中，二氧化碳溶于其中形成碳酸，使降水的 pH 值降至 5.6。若降水的 pH 值小于 5.6，则习惯上就称为酸雨。降水的形成以及降落过程中，都会吸收和吸附大气中的各种污染物质。降水中除测 pH 和电导外，常测定化学组分为 F^-、Cl^-、Br^-、SO_3^{2-}、SO_4^{2-}、NO_2^-、NO_3^-、K^+、Na^+、Ca^{2+}、Mg^{2+}、NH_4^+ 等。主要分析方法是离子色谱法。

湿法灰化 wet ashing 又称湿法消解。一种常用的消解试样的方法。在低温下用酸溶破坏有机物和分解试样，常用的是盐酸、硝酸、硫酸、磷酸和高氯酸或它们的混合物，分解含硅试样，需使用氢氟酸或含氢氟酸的混酸。与干法灰化相比，减少了元素的挥发损失，但使用大量酸，增加了玷污的可能性。新近广泛使用的微波密闭消解样品，减少了试剂用量和玷污，加快了消解速度，避免了环境污染。

湿法消化 wet digestion 又称湿法消解。是一种常用的在低温下用酸

溶液破坏动、植物、生物流体中有机物和分解试样的方法。常用的是盐酸、硝酸、硫酸、磷酸和高氯酸或它们的混合物，分解含硅试样，需使用氢氟酸或含氢氟酸的混酸。在用酸或碱液对样品消解过程中，悬浮物和固体物溶解，有机物被氧化分解为 CO_2 和 H_2O，金属元素被氧化为高价态的离子，其他易挥发物亦被除去。与干法灰化相比，减少了元素的挥发损失，但使用大量酸，增加了玷污的可能性，且溶样时间长。为了加速氧化速度，常在消化试剂中加入某些氧化剂或催化剂，如高锰酸钾、过氧化氢、五氧化二钒、过硫酸钾、钼酸钠等。新近广泛使用的微波密闭消解样品，减少了试剂用量和玷污，加快了消解速度，避免了环境污染。

湿法氧化 wet oxidation 即湿法消化。参见湿法消化条。

湿法柱填充 wet column packing 又称淤浆填充法。是将色谱填料均匀地分散在合适的溶剂中后用专门的填充设备装填到色谱柱管中的填充方法。

湿化学自动分析仪 wet-chemistry automated analyzer 以烧杯、试管为主要工具的传统分析法是以手工操作为特征的。经过几代人的努力，现在许多湿化学分析方法已经被仪器化和自动化了。其主要形式有：(1) 程序分析器，以计量杯、电磁阀和流通比色计为主要部件，经编程控制，可自动完成大部或全部化学操作，包括取样、分离、加试剂、混合、反应与测量等；(2) 连续流动分析仪 (CFA)，以蠕动泵按比例输送试样和试剂并引入空气泡，在蛇形盘管中使反应达到稳态而后测定；(3) 流动注射分析 (FIA)，由蠕动泵，旋转进样阀，化学流路和检测器四部分组成。是在典型的 ϕ0.5mm 的细径管中以实现可控的分散和非稳态测量为特征的仪器。

十八烷基键合硅胶 octadecyl silane; ODS 又称 C_{18}。是在硅胶基质表面键合上非极性的十八烷基后得到的色谱固定相。它是键合固定相的典型代表，绝大多数反相液相色谱体系都采用该固定相。

石蜡油研磨法 paraffin grinding method 在远红外区的光谱测定中常用的固体制样技术。有些固体样品极易吸潮，常用的碘化铯或聚乙烯粉末研磨时，易吸水变态，需改用石蜡油研磨法。采用石蜡油研磨时，固体样品要多加一些，用量一般要 5mg 以上。石蜡油用量一般为 1～2 滴，研磨成粘糊状，用小扁铲或硬塑料片把糊状物从玛瑙研钵中刮下，涂在两片高密度聚乙烯窗片或碘化铯窗片之间，把窗片压紧即可测试。因石蜡油在远红外区没有吸收峰，故此，在远红外光谱测定中，石蜡油研磨法是一种常用的制样方法。

石墨杯电极 graphite cup electrode 是原子发射光谱中所使用的电极之一，它是由石墨制成。石墨是很好的电极材料，因为它能导电，并且对大

多数金属和非金属的分析不产生光谱干扰。用钻头可以制作电极上的杯，样品（常常是粉末）放入电极顶部的杯中。通常杯下面的颈部较细，这样可以减少放电过程中杯中热量的传导损失。有些电极的颈部与电极的其他部位一样粗。

石墨化炭黑 graphitized carbon black 一种优良的气相色谱固定相。它可以直接用做固定相进行分离，也可对其进行各种表面处理，如涂渍少量固定液消除残存的少量活化点、酸处理、碱处理等，以适应对各种有强吸附性的极性化合物样品（例如醇、胺、酮、酸、碱性化合物）的分离。其分离作用除与化合物的极性相关外，还与化合物分子的空间结构（直链、支链、顺式、反式以及邻、间、对位）密切相关。它是由炭黑在真空中或在还原性气氛中在3000℃的高温下加热制成，在碳表面上形成石墨状的晶型，其表面均匀，活化点少，大大改善了色谱峰形，提高了分析的再现性。

石墨炉原子化器 atomizer using graphite furnace 石墨炉原子化器由加热电源、保护气控制系统和石墨管状炉组成。加热电源供给原子化器能量，电流通过石墨管产生高热高温，最高温度可达到3000℃。保护气控制系统是控制保护气的，仪器启动，保护气氩气流通，空烧完毕，切断氩气流。外气路中的氩气沿石墨管外壁流动，以保护石墨管不被烧蚀，内气路中氩气从管两端流向管中心，由管中心孔流出，以有效地除去在干燥和灰化过程中产生的基体蒸气，同时保护已原子化了的原子不再被氧化。在原子化阶段，停止通气，以延长原子在吸收区内的平均停留时间，避免对原子蒸气的稀释。石墨炉原子化器原子化在石墨管中进行。许多元素的相对灵敏度可达 $10^{-9} \sim 10^{-12} g \cdot ml^{-1}$，绝对灵敏度为 $10^{-10} \sim 10^{-13} g$。与其他几种非火焰法相比，适用元素较多，稳定性较好，应用较广。

石墨炉原子吸收光谱法 graphite atomic absorption spectrometry 以电热石墨炉为原子化器的原子吸收光谱法。里沃夫（B. V. L'vov）1959 年首先提出。他当时使用的是坩埚石墨炉电热原子化器，当今商品仪器使用的是多为改进的 Massmann 型管式石墨炉原子化器。它的优点是：（1）绝对灵敏度高，特征浓度最好可以达到 $10^{-14} g$；（2）选择性好，原子吸收信号检测是专一性的；（3）样品用量小，液体进样量通常为 5 ~ 20μl，固体进样量为 0.1 ~ 10mg；（4）分析速度快；（5）适用范围广，可以直接测定共振线位于远紫外区的元素，可以测定大约 60 种元素。它与质谱分析、活化分析并列为痕量与超痕量分析的主要方法。它的缺点是石墨炉总发热量较小，炉内温度分布的时间、空间的不均匀性引起的基体干扰较严重。进行多元素同时测定还有困难。

石墨炉原子吸收光谱绝对分析 absolute analysis of GFAAS 亦称无标样分析。不使用标准物质校正，通过

基本物理常数将分析信号与一定分析物质量相联系的分析方法。1980年斯拉文（W. Slavin）提出用特征质量 m_0 表征石墨炉原子吸收光谱分析的灵敏度。m_0 定义为产生0.0044峰面积吸光度所需被测物质的质量m(pg)：

$$m_{0_{exp}}=\frac{0.0044m}{A\cdot s}=\frac{0.0044}{S}\left(\frac{pg}{0.0044A\cdot s}\right)$$

式中，$A\cdot s$ 是峰面积吸光度；S 是校正曲线的斜率。1986年里沃夫（B. V. L'vov）提出了计算被测元素特征质量的理论模型，1990年又提出了修正模型。

$$m_{0_{cal}}=5.08\times10^{-13}\frac{MD\Delta\nu_D}{H(\alpha,\omega)\delta\gamma'f}\cdot\frac{Z(T)}{g_i\exp(-E_i/kT)}\cdot\frac{r^2}{l^2}$$

式中，M 是被测元素的原子量(g/mol)；D 是被测元素蒸气在氩气中的扩散系数（$cm^2\cdot s^{-1}$）；$\Delta\nu_D$ 是谱线的多普勒宽度；$H(\alpha,\omega)$ 是距离吸收线轮廓中心（$\omega=0.72\alpha$）的Viogt函数积分值；α 是Viogt轮廓的阻尼；δ 是邻近线影响因子；γ' 是考虑光源发射线变宽校正时的吸收线超精细结构校正因子；f 是吸收线的振子强度；$Z(T)$ 是被测原子在温度 T 时的配分函数；g_i 和 E_i 分别是原子基态的统计权重和能量；k 是波耳兹曼常数($1.38\times10^{-23}J\cdot K^{-1}$)；$r$ 是石墨管内径（cm）；l 是石墨管长度(cm)。他使用精确的物理常数计算了35种元素的特征质量，其中32种元素的特征质量的理论值 $m_{0_{cal}}$ 与实验值 $m_{0_{exp}}$ 之比在 0.85 ± 0.10 以上。其他许多实验结果亦证实，在最佳操作参数和原子化温度下，不同实验人员用同一类型的仪器在不同的日期测得的 m_0 基本相同，测定结果与标准物质的标准值相符。采用现代石墨炉原子化技术，完全有可能实现石墨炉原子吸收无标分析。

石英管原子捕集法 quartz tube atom-trapping 利用缝管捕集方式以富集原子提高火焰原子吸收光谱分析灵敏度的一种方法。石英管置于燃烧器上方，内通冷却水。试样在火焰原子化器中蒸发和（或）原子化后，为石英管表面所捕集。然后通空气排除石英管内的水、提高火焰温度，使富集在管表面的被测元素迅速原子化，瞬间原子密度增大，从而提高测定的灵敏度。它省去了化学预处理，避免了玷污的可能性。高效捕集和瞬间释放是原子捕集法获得高灵敏的关键。

石英离子交换柱 quartz exchange column 在核燃料等特殊样品的高纯分析中，为降低被测元素B、Na和Si等的空白，提高分析灵敏度和准确度，离子交换分离时采用石英制成的离子交换性。石英离子交换柱通常内径为6~8mm，长约150mm。

石油沥青针入度 needle penetration of petroleum bitumens 是指标准针在温度25℃，荷重100g，经5s垂直下落穿入沥青的深度，以1/10 mm表示。它表征沥青的硬度，针入度越

小，则沥青越硬。针入度标准测定方法按 GB 4509—84 进行，此法与 ASTM D5 相当。针入度可以作为划分沥青牌号和供用户选购的依据。

时间分辨电子自旋共振 time-resolved ESR 通常的磁场调制 ESR 只有 10^{-3}s 左右的时间分辨率。不使用磁场调制的方法，获得 10^{-6}s 或者更短的时间分辨率的 ESR 称为时间分辨电子自旋共振。时间分辨电子自旋共振谱仪中多使用锁相技术观测 ESR 信号。时间分辨电子自旋共振主要应用于光化学反应的初期过程、短寿命自由基、短寿命激发态三重态等的鉴定及反应等研究。

时间分辨傅里叶变换红外光谱 time resolved Fourier transform infrared spectroscopy; TRS 通过物质在以毫秒、微秒、毫微秒、以至飞秒的超短时间内产生的分子振动光谱谱图变化来研究分子的瞬变过程及其瞬变产物的一种方法。此方法是建立在一个最优化的时间分辨软件包的基础上进行仪器的控制、数据采集和处理，以等高线堆积图的方式显示大量成组的数据，观察其组分的特征吸收强度的增加或减少。采用 TRS 光谱法可用来跟踪许多化学反应的过程，从中获得物质丰富的物理和化学变化的动态过程中的结构信息，如高聚物薄膜在周期性的拉伸下分子的滑动，微晶的再取向，基团的弛豫、化学反应动力学，化学变化中的瞬变中间体等。

时间分辨光谱 time resolved spectra; TRS **见时间分辨傅里叶变换红外光谱**。

时间分辨化学发光 time resolved chemiluminescence 用化学发光对混合物中多种化合物进行检测时，由于这些化合物进行化学发光反应的寿命不同，因此能够在不同的时间对不同物质所产生的发光强度进行测定，这种基于测量时间不同而对不同组分进行区分的方法称为时间分辨化学发光法。

时间分辨荧光法 time-resolved fluorescence spectrometry 对混合物中荧光光谱重叠但寿命有差异的组分，通过选择合适的延迟时间和门时间可以区别和测定不同的化合物，这种方法称为时间分辨荧光法。该法可以消除杂质与背景荧光以提高信噪比，可以消除溶剂拉曼散射和瑞利散射的影响，可用于溶剂松弛的时间分辨测量进行生物大分子与基团作用的研究等。时间分辨荧光法不仅可提高测量的选择性，还有助于测定灵敏度的提高。

时间与相位增量成比例的方法 time proportional phase incrementation; TPPI 一种分离各阶多量子信息的方法，其脉冲序列为

$$90°_{\phi}-\tau-90°_{\phi+\pi}-\frac{t}{2}-180°-\frac{t}{2}-90°_{x}-\tau'$$

通常 P 阶多量子谱出现在包括频偏在内的化学位移频率区 $\Delta\omega$ 的 P 倍。引入一个相移 ϕ，使得在探测信号中的 P 阶多量子信息将分别表现为相移 $P\phi$ 的形式。这种相移不能被 180°脉冲所消除。最后利用相位循环可以分离单、双量子信息，

并消去单量子信息，只得到双量子信息。

时域信号的采集 acquisition of time-domain signal PFT-NMR 实验中的 NMR 的信号是含有体系中各种频率共振核的时间域自由感应衰减（FID）信号的总响应。为了能用计算机去分析处理，必须通过模数变换器（A/D）把它变成数字量，将 FID 信号按时间先后均匀地分割成密集的数万个数字量，然后存入计算机相应的地址，此即时域信号的采集。设取样点之间的时间间隔为 T，单位时间内取样次数为 $f_s=\frac{1}{T}$，称为取样速率或采样频率。采样频率必须足够高，才能保证获取的信号不失真。

实心载体 solid support 颗粒内部无孔隙的实心微球。用作色谱填料的载体（基质），它与流动相接触时不会产生溶胀，溶质不会在颗粒内扩散，可加快溶质在固定相中的传质速度，提高分离效率。

实验结果的诊断效能 diagnostic performance of a laboratory result 描述某分析项目对某疾病具诊断作用的价值大小。它由该分析项目的诊断灵敏度、诊断特异性、预期值及总有效率确定。

实验室间质量控制 quality control between laboratory 为评价单个实验室的特征，减少实验室间的偏差和改进实验室间的精密度，由统一机构所采取的统计学方法和措施。常用的方法有：使用各级控制样，进行比对试验，使用质量控制图等。将给定样品分发给各实验室，各自独立地进行测定，根据对测定数据进行统计分析结果，对各实验室的工作质量和水平做出评定。如由两个或多个实验室的分析人员分析同一样品或标样，检查各实验室分析人员测定结果的准确度和精密度，以评价其分析测试水平和能力。

实验室内的双份测定 intra-laboratory duplicates 一种简易的实验室内质量控制方法。将标本分成两份，由实验人员进行随机测定，测定值间的差值（R）可反映操作的不精密度，也是主管人员抽查一般工作人员操作水平的常规方法。

实验室内质量控制 quality control within laboratory 在一个实验室内，为保证分析系统能给出可接受和可重复的结果而采取的措施。这些措施包括制定和实施统一的操作规程，进行岗前技术培训，实施持证上岗制度，使用各级控制样和质量控制图等。

食品防腐剂分析 food preservative analysis 一类能抑制微生物活动，防止食品腐败变质以延长保存期的一类食品添加剂。按其作用不同分为防腐剂、消毒剂、防霉剂、杀虫熏蒸剂和保鲜剂。常用的防腐剂有苯甲酸、山梨酸、酒石酸等及其盐类，二氧化硫及亚硫酸盐等。分析方法包括比色法、分光光度法及色谱分析法等。

食品添加剂 additives 为改善食品品质和色、香、味，以及为防腐和加工工艺的需要而加入食品中的化学合成或天然物质。在我国，食品营养

强化剂也属于食品添加剂。食品卫生法明确规定：食品营养强化剂是指"为增强营养成分而加入食品中的天然的或者人工合成的属于天然营养素范围的食品添加剂"。

食品添加剂分析 food additive analysis 食品添加剂是为改善食品质和色、香、味以及为防腐或根据加工工艺的需要而加入食品中的化学合成或者天然物质。目前世界上直接使用的食品添加剂约有4000多种，常用的有600余种。按中国"食品添加剂使用卫生标准"规定，共分为防腐剂、抗氧化剂、发色剂、甜味剂、增味剂、保鲜剂等27类。为保证食品添加剂的安全使用，采用包括滴定法、比色法、分光光度法及色谱分析法等进行分析。

食物系数 food factor 含有某种残留农药的食物，占全部饮食量的比率，用百分率表示。通常是通过食物消费量调查，用统计方法求出一个成年人一天的平均食物消费量和各种食物所占的比率。

始漏点 starting leak source 离子交换过程中，随试液的不断加入，交界层（树脂层中部分被分离离子所交换而部分未被交换的层次）逐渐下降，当流出液开始出现被交换离子时称为始漏点，此时交换于柱上的离子的量称为始漏量。始漏量小于交换容量。

示差折光检测器 differential refraction detector 又称折射率检测器。是基于纯溶剂（流动相）的折射率与柱流出物（含溶质的流动相）的折射率存在差异的原理，连续地检测柱流出物折射率变化的检测器。它是一种通用型检测器，检测灵敏度在$10^{-6}\sim10^{-7}g\cdot ml^{-1}$，属中等灵敏度的检测器。对于没有合适紫外吸收基团的有机分子（如某些糖和酯），常采用这种检测器。

示踪方法 tracer method 通过观测示踪剂的行为来研究和追踪某一物质动态行为的一种技术。被追踪的物质称为示踪剂，它可以是稳定性同位素或放射性同位素。用放射性核素为示踪剂时，既要考虑到易于探测和追踪，又不要造成对环境的过分长期的污染，为此要注意选用合适半衰期的核素作为示踪剂。

示踪元素 tracer element 作为示踪剂引入体系内的放射性元素。利用放射性元素易于被探测的优点以指示和追踪元素或化合物在体系内的行为，如在生物医学中用来研究物质在体内或细胞结构内的分布和转移，物质或药物在体内的代谢速度和途径等，在工业、农业、环境科学等领域都有广泛的应用。

示踪原子 tracer atom 又称标记原子。是利用其同位素特征标记同种元素的原子。分稳定性同位素和放射性同位素示踪原子两类，前者是以其不同质量数作为标记，后者以其放出的特征射线作为标记。主要用来了解和追踪其他不易或不能被辨认的物质在实验过程中的动态行为和分布转移的规律。

式量电位 formal potential; $\phi^{\ominus'}$ 在一定的介质条件下，氧化形、还原形的分析浓度都是 1mol·L⁻¹时的氧化还原电对的电极电位。

视场 field of vision 显微镜中在物镜下的可观测区域。根据显微镜视场区背景的明暗程度可以将电镜分为明视场和暗视场两种照明形式。

试管内分析 in vivo 参见**活体分析**条。

试剂空白 reagent blank 在分析测定中，所用试剂若含有微量被测组分或其他对测定有响应的干扰组分，则会在测定时产生一定的附加响应值，称为试剂空白。它会影响分析结果的准确度。消除试剂空白最常用的方法是，按试样溶液相同条件和方法配制、但不加入被测组分的试剂空白（溶液）来测定试剂空白值，并对测定试样的响应值进行校正。参见**空白溶液**条。

试剂显色法 reagent color-developing method 若色谱分离后的化合物在紫外光或可见光下不能显示斑点，可根据被检出化合物的理化性质选择适当的显色剂经反应后使之生成有颜色、稳定、轮廓清楚、灵敏度高、专属性强的斑点，从而可进行定性、定量分析。有时显色反应需要加热，即将喷显色剂后的纸或薄层放置在烤箱内于 100～115℃加热 10～15min，有时还需更高的温度。

试验设计 design of experiment 亦称实验设计。是以概率论和数理统计理论为指导，为获得可靠试验结果和有用信息科学地安排试验的一种方法论。它研究如何高效而经济地获取所需要的数据及其分析处理方法。它是 20 世纪 20 年代由英国生物统计学家费歇尔（R. A. Fisher）首先提出，最初用于农业与生物学领域，以后逐步推广到其他的领域。在分析测试中，常用的试验设计方法有正交设计、均匀设计、正交回归设计、单纯形优化设计等。

试验指标 experimental index 用来衡量实验效果的质量指标。它可以是单一的质量指标，亦可以是多个质量指标。按试验指标的性质，可以分为定性指标与定量指标。前者是由人的感官直接评定的指标，如水质的恶臭程度，油漆的亮度等，品茶师品酒师为茶、酒评定等级，凭的都是感官指标。后者是能用某种仪器或工具准确测量的指标，如产率、吸光度、谱峰高度或峰面积、谱线强度等。

室电极法 method of chamber electrode 给试样加入卤素及其化合物后，装入室电极中，在直立弧光中稳定地燃烧，可以产生高温化学反应，使待测元素转化为易挥发的卤化物，从石墨塞的小孔中蒸发出来，进入弧焰，而其他元素在该温度下不形成易挥发的卤化物被残留在室电极中。因而，实现了分馏蒸发，改善了元素的检出限和结果的准确度。例如，在分析矿石中的碲时，在试样中加入碘，采用室电极法，检出限可达 0.0003%。

室间标准差 standard deviation be-

tween laboratory 由于不同实验室不同操作者的差异，或虽为同一操作者用相同的方法但由于测定条件（不同仪器设备、不同的时间）的差异，使得测量值产生波动而形成的标准偏差。

室内标准差 standard deviation within laboratory 由于随机因素影响，使得同一操作者用相同的方法，在同一条件下在短时间内重复测量同一试样的测量值产生波动而形成的标准偏差。

室温磷光法 room temperature phosphorimetry; RTP 通过将试样点在固体基质上使之刚性化，或利用保护性介质减少非辐射碰撞失活和氧气等猝灭作用等条件控制，在室温下实现磷光测定的方法。克服了低温磷光（LTP）法中需要把试样预先冷却到液氮温度（77K）形成刚性玻璃体后观察磷光等缺点。相继提出的有固体基质室温磷光法、胶束增稳室温磷光法、敏化/猝灭室温磷光法、胶态-微液晶室温磷光法、环糊精诱导室温磷光法、衍生室温磷光法、微乳状液增稳室温磷光法、混合有序介质室温磷光法和微囊增稳室温磷光法等。新近还有无保护性介质流体室温磷光的报道。

铈量法 Cerate redox method 以Ce(Ⅳ)溶液[如$(NH_4)_2Ce(SO_4)_3 \cdot 2H_2O$，$(NH_4)_2Ce(NO_3)_6$等]作为滴定剂滴定具有还原性物质的一种氧化还原滴定法。Ce(Ⅳ) + e $\rightleftharpoons$ Ce(Ⅲ)氧化还原半反应是单电子可逆反应，其电位与滴定溶液的酸度和存在的阴离子有关。铈量法的优点是：氧化性强，在4mol·L^{-1} $HClO_4$中Ce(Ⅳ)能定量氧化多种有机物，如甘油、葡萄糖等，在H_2SO_4中的氧化能力稍次于$KMnO_4$；反应简单，副反应少；可直接由$Ce(SO_4)_2$，$(NH_4)_2Ce(NO_3)_6$或$Ce(SO_4)_2 \cdot 2(NH_4)_2SO_4 \cdot 2H_2O$等配制标准溶液，且标准溶液稳定；有好的指示剂，如邻二氮非-亚铁等指示终点。主要缺点是试剂价格较贵，若有其他方法可选，一般不用。其次是Ce(Ⅳ)易水解，不适于在中性或碱性溶液中滴定，以及与某些还原性物质的反应速度不够快，需加热或加催化剂。

释放剂 releasing agent 能从被测元素与干扰组分形成的难解离化合物中将被测元素释放出来的物质。其作用是与干扰组分（元素）生成更稳定的配合物。如加入锶或镧，它们与磷酸根生成比磷酸钙更稳定的磷酸锶和磷酸镧，从磷酸钙中将钙释放出来，从而消除了磷酸根对钙的干扰。

手动进样器 manual injector 用微量注射器吸取样品溶液后，将样品手工注入进样阀，再人工转动阀柄将样品导入色谱柱的进样器。其主要部件是带有样品环的多通阀（如六通阀和十通阀）。手动进样灵活性强，对研究性工作或样品数不多的常规分析比较合适。

手性氨基酸衍生物GC固定相 chiral amino acid derivatives stationary phase in GC 一种基于氢键作用的固

定相。对映体与手性固定相通过氢键作用缔合，形成非对映异构的络合物，由于氢键作用强度的不同，所形成的非对映异构络合物的稳定常数也不同，导致对映体流出顺序有先后，从而达到对映体分离的目的。手性氨基酸衍生物固定相与对映体间的作用，除了氢键作用外，还存在其他作用，如偶极-偶极相互作用，色散力等。

手性拆分试剂 chiral selectors 在毛细管电泳手性分离中，向缓冲溶液中添加的手性试剂。如环糊精及其衍生物、胆汁盐等。参见**手性试剂**条。

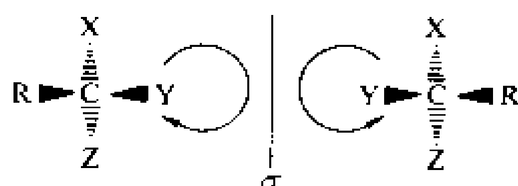
手性固定相 chiral stationary phase 具有手性识别功能，能选择性地保留和分离手性异构体（对映体）的色谱固定相。可用作手性固定相的分子很多，如多糖类衍生物、肽、蛋白质、环糊精及其衍生物、手性二萘、手性尿素衍生物、奎宁和奎尼定衍生物、手性冠醚等等。含肽或蛋白质基团的手性固定相是把蛋白质、酶和抗体等生物大分子键合到硅胶基质上制得，用来分离生物、医药和临床等方面的手性异构体。

手性固定相拆分法 chiral solid phase separation 早期的手性吸附剂，多用天然材料如淀粉、石英，以后发展成葡聚糖、配基交换剂、纤维素衍生物、环醚及手性传荷固定相等。20世纪70年代后期，根据手性试剂与溶质间作用的理论研究，设计了各种将手性试剂固着于多种基质上的新型手性固定相。它们具有简便、广泛的适用性及立体选择性好等优点，发展甚快。分为5大类：吸附作用络合物；配基交换；包埋络合物；蛋白亲和相；手性聚合物。参见**手性固定相**条。

手性环糊精衍生物GC固定相 chiral cyclodextrin derivatives stationary phase in GC 一种选择性高、应用面最广的手性固定相。环糊精分子呈圆筒状结构，腔内的电子云密度较高，具有疏水性，而腔外圆筒上、下口边具有亲水性，可包含大小合适的有机分子。每个葡萄糖单元具有5个手性中心，为手性拆分提供了良好的不对称环境。其拆分机制可认为是多种相互作用的结果，既可能是圆筒状结构与对映体形成非对映体的包含络合物（对映体进入环糊精的空腔），手性识别同时发生于环糊精分子的内部和上、下口边，而不是形成包含络合物；也可能是环糊精与对映体分子之间的范德华力等。

手性基团 chiral group 物或像具有的不能完全叠合在一起的性质称为手性。具有手性的化合物分子称为手性分子。手性分子中必存在手性中心。一个碳原子倘若连接着4个都是不同的基团，它就是一个手性中心。此碳原子称为手性碳，记以C^*。具有不对称中心原子的分子都具有光学活性。例如一个含有一个不对称碳原子的手性分子，记以$R—C^*XYZ$，它的4个不同的基团的空间位置可以按两种不同的排列顺序构成恰如左右

手、互为镜像、不能完全重叠的两个分子。



其中一个分子产生右旋，而另一分子将产生左旋。它们被称为是一对对映体。手性中心不局限于中心原子为四面体的结构，也可用于正八面体和四方棱锥体结构。若有手性分子如 R—CH_2—C^*XYZ，其中—C^*XYZ 称为手性基团，与手性基团相连接的—CH_2—基团称为前手性或原手性（prochiral）基团，其中的两个氢原子不论碳-碳单键旋转得多快，总是处于不等价的不同分子构象中，平均来看，化学位移不同。这两个氢往往构成复杂的 AB 自旋系统。若—CH_2—上的氢皆换成—CH_3 则这两个甲基也表现为不等价，化学位移也不同。因此在立体化学中称此两个氢的位置为异位的（heterotopic）。一旦其中一个氢被另外基团取代，可能产生两种非对映异构体中的一个，故称为非对映异位的（diastereotopic）。非对映异位的两个氢原子，在核磁共振中化学位移是不同的。

手性金属络合物 GC 固定相 chirametal stationary phase in GC 一类重要的气相色谱手性固定相。要求被分析物质具有 π 电子或孤对电子，分离机制主要基于 π-π 相互作用，此外偶极-偶极相互作用也存在。拆分对象主要为低沸点的烃，环酯、环醚、醇、酮、酯、乙缩醛和缩醚等。由于手性金属络合物固定相中金属离子是以配位键的形式与其他原子相结合，热稳定性较差，使用范围在 25～120℃之间，分离高沸点化合物比较困难，若接枝在聚硅氧烷上，可将使用温度提高到 170℃。

手性流动相 chiral mobile phase 含有手性识别功能试剂的流动相。手性色谱除可采用手性识别固定相外，还可以采用在流动相中加入手性试剂的方法，手性试剂与待分离手性异构体反应生成的 L 体和 R 体衍生物的性质有差异，在非手性固定相中即可分离。如分离离子型对映体药物时，可以用含手性离子对试剂的流动相，在反相液相色谱柱上分离。

手性流动相拆分法 chiral mobile phase separation 手性流动相拆分法也称手性洗脱法或手性流动相添加剂法。它不必事先将样品制备成手性衍生物，而只需将手性剂加入流动相中，手性添加剂与样品形成手性络合物。手性添加剂主要有配基交换型、手性离子对络合物、环糊精等。参见**手性流动相**条。

手性气相色谱法 chiral gas chromatography 气相色谱柱中填充各种类型的手性固定相，可直接对手性化合物或对应异构体进行分离和测定。要求手性固定相必须具有手性识别的立体结构，即至少含有一个手性中心；应具有低的熔点和高的沸点，以便于在宽的温度范围内使用；可涂性

好，以便制备出高柱效的毛细管柱。现常用的气相色谱手性固定相有三大类，即基于氢键作用的氨基酸衍生物手性固定相、基于配位作用的金属络合物手性固定相和基于包含作用的环糊精衍生物、杯环芳烃和冠醚等手性固定相。

手性色谱 chiral chromatography 采用手性固定相或添加了手性试剂的流动相进行手性异构体（对映体）分离的色谱技术。液相色谱和气相色谱都可以进行手性异构体分离。它利用手性固定相或手性流动相中的手性试剂与被测手性异构体分子的空间和特异相互作用的差异，将对映体拆分开。手性色谱在生物和医药领域具有重要应用。

手性试剂 chiral reagent 具有手性识别能力、本身具有手性中心的有机试剂，包括溶剂、催化剂等。这个手性中心可以是碳，也可以是构型稳定的三配位或四配位的 B、Si、As、Sb、S 和 P 等原子。利用手性试剂可使无手性或前手性单元生成不等量的对映体产物，或与手性反应物进行择向反应，合成不对称化合物。它与手性对映体中的 D 构型体和 L 构型体反应生成的化合物具有色谱差异性，能采用液相色谱拆分它们。例如，在流动相中加入手性试剂，它与手性对映体的 D 构型体和 L 构型体反应生成的化合物与流动相和/或固定相的作用力产生差别，于是在非手性固定相上也能得到分离。利用对映体在手性溶剂中的溶解度的不同亦可以分离它们。手性位移试剂可以对许多有手性中心的化合物进行结构分析，估计该化合物的 D、L 型含量。

手性衍生化法 chiral derivation method 对映体混合物以手性试剂作柱前衍生化，形成一非对映异构体对，然后以常规固定相分离，称为非直接衍生化法。

寿命 lifetime 从物质的特定状态到消亡状态为止的时间。大多数粒子在某一特定状态时，每一个粒子的寿命从量子力学的角度而言是非确定的，但寿命的分布在量子力学上可以精确测定，因此，寿命一般指平均寿命。放射性物质一般以一级反应蜕变，其平均寿命为蜕变常数的倒数。若以 N 表示蜕变状态数，以 λ 表示蜕变常数，则单位时间蜕变的状态数为 $-\mathrm{d}N/\mathrm{d}t = \lambda N$。若初始状态数为 N_0，则 $N/N_0 = \exp(-\lambda t)$。因此平均寿命用下式表示

$$\tau = \frac{\int_0^\infty tN\mathrm{d}t}{\int_0^\infty N\mathrm{d}t} = \frac{\int_0^\infty te^{-\lambda t}\mathrm{d}t}{\int_0^\infty e^{-\lambda t}\mathrm{d}t} = \lambda^{-1}$$

若蜕变通道有多个，则 $\lambda = \sum \lambda_i$。对于发光的光物理过程、化学反应等特定状态或物质以一级反应衰减时，其寿命与放射性物质的情况相同，平均寿命 τ 等于一级反应速率常数的倒数。若某种状态或物质按二级反应衰减，平均寿命变为无限大，无法准确定义。因此有时用半衰期 $\tau_{\frac{1}{2}}$ 来表示。对一级反应而言，$\tau_{\frac{1}{2}}$ 与 τ 关系：$\tau_{\frac{1}{2}} = \tau\lg 2$。

寿命增宽 lifetime broadening ESR谱线的位置与跃迁前后的两个能级之差有关，若能级存在一定的宽度，则ESR谱线也必定有一定宽度。因为电子并不是静止地停留在某一固定能级上，而是不停地在两个能级之间跃迁，这是一个动态平衡过程。因此电子停留在某一能级上的寿命 Δt 只能是个有限值。这样，根据量子力学中测不准关系式（$\Delta E\Delta t \sim \hbar$），电子在某一能级上的寿命 Δt 越短，该能级的宽度 ΔE 就越大，因而ESR谱线的寿命增宽也越大。

受激发射 simulate emission 处于能态的激发态原子，在入射辐射的诱导下跃迁到较低能态同时发射辐射的过程。受激发射的辐射频率与入射辐射的频率相同，位相相同，偏振方向和传播方向相同，受激发射产生的是相干辐射。在 dt 时间内，受激发射的原子数 dN_{ji} 与处于较高能态 j 的原子数 N_j 及频率为 ν 的入射辐射密度 ρ_ν 成正比。

$$dN_{ji} = B_{ji}\rho_\nu N_j dt$$

式中，B_{ji} 是受激发射系数，表示单位时间内在单位入射辐射密度作用下原子通过受激发射从较高高能态 j 跃迁到较低能态 i 的几率。

受激发射跃迁 stimulated emission transition 处于激发态的原子，在入射辐射的诱导下回到低能级，同时发射与入射辐射的频率、相位、偏振方向以及传播方向相同的辐射，这种跃迁方式被称为受激发射跃迁。其特点是每个光子的发射不是自发的，必须有外来光子的刺激或诱导。

受激拉曼散射 stimulated Raman scattering 当入射光强度超过某一阈值时，散射光的光子数具有按指数规律放大的特性，产生的散射光称为受激拉曼散射，是相干光辐射，强度可大到与入射光强度相当的数量级，而且具有良好的单色性和方向性。产生受激拉曼散射时还伴有分子或晶格的剧烈振动。

受激拉曼散射效应 stimulated Raman scattering effect 当入射激光强度大于某一阈值时，它产生的拉曼散射光的强度也很大并成为一个辐射光源，它又作为一种激发光源作用于分子产生次级的拉曼散射，如此继续，可产生一系列的拉曼散射。这种现象称为受激拉曼散射或受激拉曼效应。受激拉曼效应产生的条件是激发线的强度必须高于阈值强度。与正常拉曼散射的区别在于，受激拉曼散射线的强度不是远小于而是可与激发线的强度相比拟。

受激拉曼增益 stimulated Raman gain 在受激拉曼散射中，如果在输入泵浦光（ω_L）的同时，再输入一斯托克斯频率（ω_S）的光，且当 $\omega_L > \omega_S$ 时，则探测光的强度将会被放大而出现增强，这种增强称为受激拉曼增益。

受激吸收 simulate absorption 处于辐射场中的原子从辐射场中吸收能量跃迁到较高能态的过程。当有频率为 ν 的入射辐射密度（单位体积内的辐射能）为 ρ_ν 的辐射照射单位体积内的原子蒸气时，在 dt 时间内，原子吸

收能量由能态 i 跃迁到较高能态 j 的原子数 dN_{ij} 与入射辐射密度 ρ_ν 及处于能态 i 的原子数 N_i 成正比。

$$dN_{ij}=B_{ij}\rho_\nu N_i dt$$

式中，B_{ij} 是受激吸收系数，表示单位时间内在单位入射辐射密度作用下原子通过受激吸收从低能态 i 跃迁到高能态 j 的几率。

受激吸收跃迁 stimulated absorption transition 如果辐射场的能量等于原子中的电子由低能态跃迁到光谱选择定则所容许的较高能态所需要能量，原子就要从辐射场中吸收能量跃迁到较高的能态，同时伴随着原子吸收光谱的产生，这种跃迁方式被称为受激吸收跃迁。其特点是每个原子的吸收跃迁不是自发的，必须有外来光子来刺激或感生才会发生。

受控分散 controlled dispersion 样品带从注入口到检测器的这一段路程，实际上是样品带在试剂中分散的过程。这种分散主要受载液流速和管路长度的制约，可受人为控制，故称受控分散，即时空受控分散，是 FIA 的核心技术。

受体 receptor 能识别来自细胞外的刺激物质，并将其信息传递到细胞内部的物质的总称。除少数外，大部分受体都由蛋白质构成。荷尔蒙，神经递质，免疫球蛋白，与嗅觉、味觉有关的物质，信息素等性诱发物质，氨基酸、糖等等都是通过受体而发挥作用的，一般无机物不作为受体的识别对象。受体可存在于细胞膜或细胞质中。胰岛素、乙酰胆碱等多数物质的受体存在于细胞膜中，类固醇荷尔蒙等的受体存在于细胞质中。受体的功能是与作用物的特异结合以及由此产生的受体的高次结构（大多数情况下由一些亚单元构成）的变化。通过特异结合，细胞可以敏锐地捕捉痕量作用物质并有可能与之反应。对细胞膜性受体而言，高次结构变化紧接着会合成环状 AMP 等环状核苷，使离子通道活化，诱发纤维醇磷脂反应等，引起复杂的膜内反应以及由此产生向细胞内放出二次信息物质。然后通过蛋白质的磷酸化以及酶的活化，产生多姿多彩的细胞内反应。细胞膜性受体的功能是与 GTP 等核苷结合，通过蛋白质、受体周围存在的特定脂质分子接受复杂的调节作用。而细胞质性类固醇荷尔蒙受体，其高次结构发生变化会使之与细胞核内的 DNA 发生特异结合，从而与遗传信息的传递与调节相关。与受体有关的研究涉及面很广，如能结合病毒、细菌的受体；可与结合在免疫 B 细胞上的抗原反应的 T 细胞受体等细胞间相互识别与相互作用有关的研究，发光人工受体的研究等等。

疏溶剂理论 solvophobic theory 指完全或部分疏水性溶质分子受到极性溶剂的排斥而被烃类固定相吸引。它为处理反相高效液相色谱中的一些现象提供了理论构架，有助于考虑流动相性质和固定相的表面性能。也就

是说，在反相高效液相色谱中，非极性溶质是因为与极性溶剂之间的斥力，而不是与固定相之间的微弱非极性作用力（色散力）而被固定相所保留。

疏溶剂色谱法 solvophobic chromatography 基于非极性溶质受极性溶剂排斥而被非极性固定相所保留的原理而实现分离的色谱方法，即现在通常所说的反相高效液相色谱法。

疏溶剂作用理论 solvophobic interaction principle 指完全或部分疏水性溶质分子受到极性溶剂的排斥而被烃类固定相吸引。它为处理反相高效液相色谱中的一些现象提供了理论构架，有助于考虑流动相性质和固定相的表面性能。非极性烷基键合相是在硅胶表面蒙覆了一层以 Si—C 键化学键合的十八烷基（或其他烃基）的分子毛，这种构成分子毛的长链脂肪烷基具有较强的疏水特性。对一个被分离的有机化合物来讲，可把整个分子看成是非极性部分和极性部分官能团部分所组成。溶质分子与键合相表面的烷基之间的疏溶剂化作用是溶质分子与键合烷基之间的一种可逆缔合作用。缔合作用强度和溶质的色谱保留值，取决于以下 3 个因素：溶质分子中非极性部分的总表面积；键合相上烷基的总表面积；洗脱液的表面张力。

疏水作用色谱 hydrophobic interaction chromatography 采用具有适度疏水性的填料，以含盐水溶液作流动相，借助于溶质与固定相间的疏水相互作用实现分离的色谱方法。其保留机理与反相色谱基本相同，所不同的是其固定相的疏水性不如反相固定相强，多为低密度分布的甲基、乙基、丙基、丁基和苯基等。疏水作用色谱主要用于蛋白质的分离与纯化。

蔬菜农药残留物快速测定法 vegetables pesticide residues rapid analysis 市面上的杀虫剂主要有三大类：有机磷类、氨基甲酸酯类和合成除虫菊酯类。合成除虫菊酯类对人畜的毒性较低，而有机磷类和氨基甲酸酯类毒性较高，残留问题较受重视。此两类杀虫剂均为神经系统胆碱酯酶（cholinesterase）的抑制物。蔬菜农药残留快速测定法先采用纯化的胆碱酯酶与蔬菜样品提取物反应，若提取液中含有残留的有机磷或氨基甲酸酯，胆碱酯酶的活性将受到抑制，含有除虫菊酯的提取液并不与胆碱酯酶反应，其活性不受影响。然后用分光光度计测定胆碱酯酶的吸光度，分析其活性受抑制的程度，判断蔬菜农药残留情况。该法操作简便，分析成本低，能在大量的样品中快速地筛选出有毒蔬菜样品，能及时有效地帮助检验检疫人员把好质量关。

熟成指数 ripening index 亦称熟成度。表示黏胶溶液经自身一系列化学和物理化学变化后的稳定程度。它是黏胶纤维生产过程中半制品的控制分析项目之一。以对电解质溶液的稳定性表示，有三种试验方法：（1）氯化铵法（氯化铵值），使黏胶凝固

时耗用10%的氯化铵溶液的以毫升为单位的体积数，适合用于较"熟"黏胶的分析；（2）电解法，使黏胶凝固时耗用100ml硫酸铵溶液的百分浓度；（3）氯化钠法（盐值），使黏胶凝固时的氯化钠溶液浓度。黏胶的熟成指数愈大，黏胶溶液的稳定性愈好，即黏胶愈"黏"；反之，则黏胶愈"熟"（或"老"）。

树脂的交联度 degree of cross-linking of a resin 树脂是具有立体网状结构的高聚物。为使单体上下左右聚合成立体网状结构，在制备时加入一种交联剂（如二乙烯苯），它在原料总质量中所占的质量分数，称为树脂的交联度，通常以ω_{DVB}%表示。交联度的大小不仅影响离子交换剂的溶解度，而且也影响它们的机械稳定性、交换容量、吸水性及抗化学性等。一般树脂的交联度为2%～24%，常见的是8%左右。

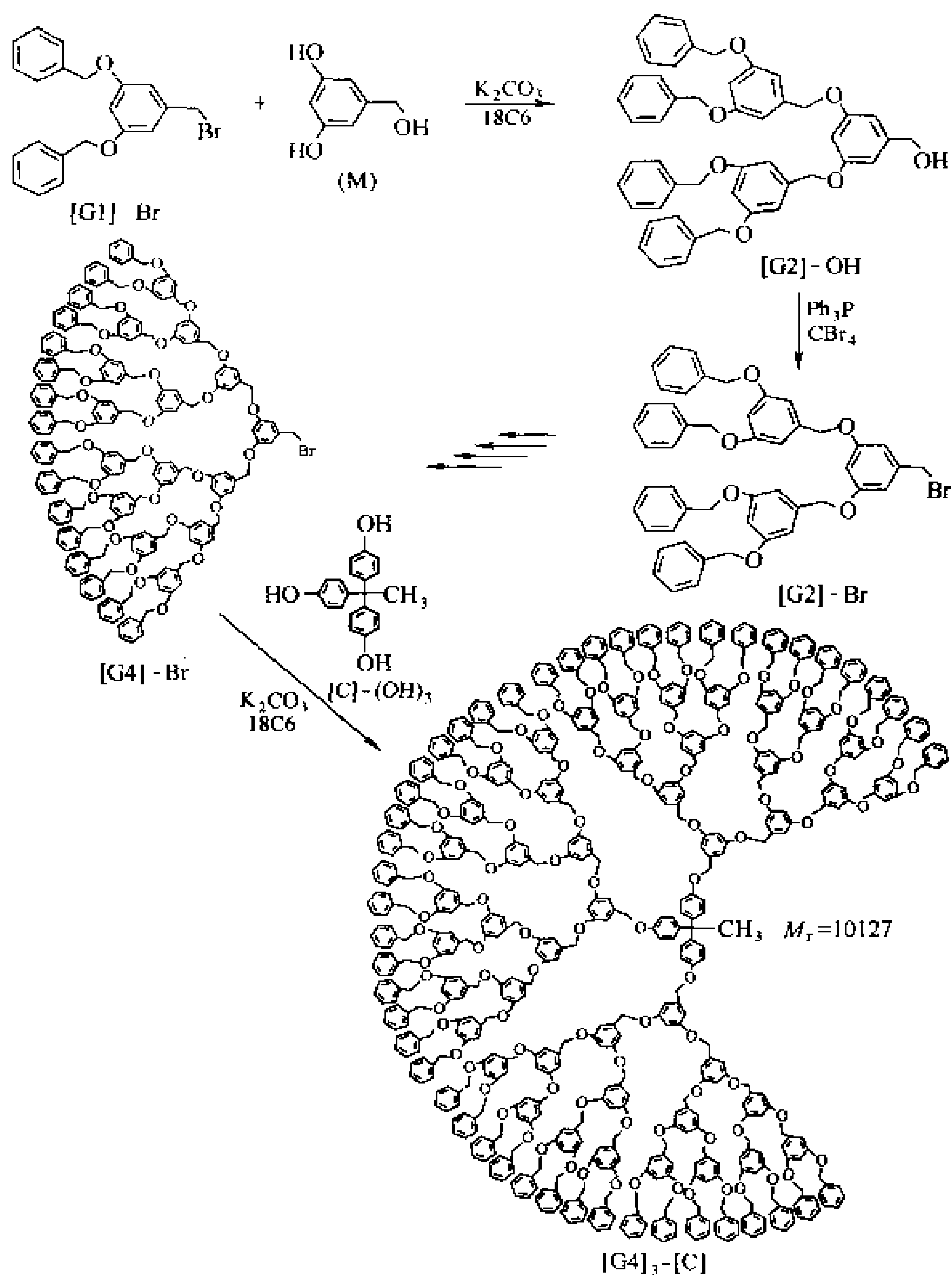
树脂点滴试验 resin spot test 利用阴、阳离子交换树脂的吸附选择性，通过观察有色离子被离子交换树脂吸附或经离子交换而被富集的情况来进行离子鉴定的方法。

树脂交换容量 exchange capacity of resin 1g干的离子交换树脂所能交换的离子的量（毫摩尔数）。是评价离子交换树脂性能的一个重要参数。

树状大分子 dendrimer 一种由单体形成的树枝状分叉的三维空间排列的高分子。由于分支很多，达到一定分子量以上后便成为球状结构。与一般高分子相比，这种分子的特点是完全均一。树状大分子的合成方法有发散法与收缩法等。前者是从分子中心开始向外合成，后者由外向内合成，最后与中心部分对接，下页图是收缩法合成的一个例子。此外，也可以利用氢键等分子间相互作用，通过分子自组装合成树状超分子。树状大分子表面官能团排列紧密，内部空隙较多，其内部空隙可以与客体分子结合。表面排列有金属络合物的树状大分子还有可能作为催化剂。对其表面官能团进行修饰，使之带有光、电活性的官能团，有望成为新型材料。

数据处理 data processing 对数据的进一步加工。它包括数据可靠性检验、拟合、解析、特征提取、各种运算等，其目的是通过数据处理将蕴含在数据中的信息提取出来，转化为人们所需要的结果与信息，并以适当的形式表示或显示，以利于信息的利用。数据蕴含着信息，但不等于就是信息，信息是经数据处理后所得到的知识和对研究对象规律性的认识。

数据还原 data reduction 在晶体结构测定中，根据实验条件，将实测得到的相对衍射强度，对一系列有关的影响因子进行修正、统一并还原为结构振幅的过程。一般包括从衍射总强度中扣除背景衍射、计算衍射的标准偏差，对洛伦兹因子和偏极化因子进行修正，求算衍射强度的比例因子和温度因子等等。



收缩法合成树状大分子图

数据库　data base　为特定目的而将相关数据文件、现有计算机程序和例行程序集中在一起的完整系统，不仅能有效地存贮数据，而且也能有效地检索信息，是计算机化管理信息系统的基础。

数均分子量 number mean molecular weight; M_n 又称加权算术平均分子量。在液相色谱法（凝胶色谱法）中是指对高分子聚合物中不同分子量的个数进行加权平均后得到的聚合物分子量的表征值。如由 10 个分子量为 100 和 5 个分子量为 1000 的混合物的数均分子量为

$$\frac{10\times100+5\times1000}{10+5}=400$$

数理统计 mathematical statistics 研究和揭示随机现象统计规律性的一门数学学科。随机现象在个别试验中它有可能发生、也有可能不发生，呈现不确定性，而在大量的重复试验中，又呈现统计规律性的一类现象。随机现象可以通过随机试验进行研究，所得到的数据有两个基本特征：一是在同样条件下测得的数据参差不齐，具有波动性；二是在大量重复试验中得到的数据又具有统计规律性。在科学实践中，测量值是一个以概率取值的随机变量，由于各种不可控制的偶然因素的随机和综合的影响，使得测量数据具有波动性，应用数理统计方法处理数据的目的，就是要从这些参差不齐、表面看来似乎杂乱无章的数据中发现寓于其中的统计规律性。数理统计在试验数据处理中有着广泛的应用。

数字滤波 digital filter 对 FID 信号作合理的加工处理以改善谱图的质量的一种技术。包括改变谱图的线形、提高分辨率、提高灵敏度，避免或减轻谱峰的畸变等。通常是在傅里叶变换前对时域信号进行加工处理。用于 NMR 的数字滤波技术有指数滤波、洛伦兹线形变换到高斯线形的滤波，伪回波变换滤波、褶积差滤波等。数字滤波应首先确定滤波函数 $g(t)$，然后用 $g(t)$ 去乘时域的自由感应衰减（FID）信号 $S(t)$，对乘积函数进行傅里叶变换，得到经过数字滤波的频率谱。

数字正交检波 digital quadrature detection 正交检波中所用的两个相检波器的增益不可能完全一致，它们的相位差不可能严格为 90°，因此仍可能出现谱线的折叠。克服它的办法是引入数字正交检波。用计算机控制移相器，使射频脉冲的相位按 0°，90°，180°，270° 循环，并对两路信号交替使用两个相检波器来达到目的。计算机存储 FID 数据时，两路相检波输出数据存入两个内存数据区。第一路采集的数据放在 A 区，第二路放在 B 区，当相位改变 90° 时，第一路数据放在 B 区，第二路放在 A 区，相位每移动 90° 就互换一次存放数据区，直到一组数据采集完为止。原始数据的实部在 A 区，虚部在 B 区。计算机对数据作复数快速傅里叶变换，便得到能区分正、负频率的频率谱，消除折叠。

衰减全反射 attenuated total reflection; ATR 当光从折射率大的棱镜（光密介质）射入折射率小的样品（光疏介质）的界面时，若入射角 θ 超过某一临界值，就会在界面上产生全反射。制作棱镜的材料主要有

KRS-5（$n=2.4$），KRS-6，AgCl（$n=2$），Irtran-2 和 Ge（$n=4$）等。样品紧贴棱镜背面，调整入射角 θ 使入射光深入到样品一定深度（通常从 < 1μm 到 5μm）后发生全反射。样品对某些红外波长产生选择性吸收，从棱镜反射出来的这些波长的光减弱，此即衰减全反射。红外光衰减的程度与样品对其吸收性能和穿透深度有关，而与样品本身的厚度无关。一次全反射的光能量衰减很小，谱带很弱，经过 30～50 次的全反射，即可获得足够强的谱带。衰减全反射的重要优点是样品不受到破坏。利用 ATR 法可改变内反射晶体的材料和光线的入射角来改变透射深度，以便研究不同深度的表面结构。应用于难溶解和不熔融物以及难于粉碎的弹性体或黏性物质，如硫化橡胶，热固性树脂，人造革和聚氨酯泡沫等高分子材料的分析，催化剂表面特性及表面涂层的研究。

衰减全反射光校正 attenuated total reflectance correction；ATR 一种对以衰减全反射光技术测得的红外光谱图进行校正的数学处理方法。ATR 法测量时，相同入射角 θ 的光束，对样品的穿透深度 d_p 是波长的函数。

$$d_p=\frac{\lambda_i}{2\pi n_1(\sin^2\theta-n_{21}^2)^{1/2}}$$

式中，λ_i 是辐射的波长；n_1 是 ATR 晶体的折射率；n_{21} 是样品和 ATR 晶体折射率的比率。可见，短波光穿透样品深度短，光吸收率低，而长波光穿透得长，吸收率高。因而导致光谱谱图强度畸变，即随入射波波长而异。ATR 校正将吸收曲线之处的强度乘上随波长 λ_i 与接触因子 c 而变化的修正因子 f_i。

$$f_i=\frac{\lambda_{\min}-c}{\lambda_i-c}$$

式中，$\lambda_{\min}$ 为光谱图中的最短波长。这样在最短波长处吸收率保持不变，当样品为液体时，它与 ATR 晶体接触良好，故 $c=0$，f_i 与 λ_i 成正比。当样品为固体时，它与 ATR 晶体接触不那么好，c 值较大，长波段相对短波段有明显衰减。因此校正时可调节 c 值达到修正强度畸变的目的。若过度校正会导致谱图中长波端信息的丢失。

双保留机理 dual reservation mechanism 在烷基键合相的表面上是不均匀的，除了烃类配位基外，还有残余硅羟基。这是一种显微酸性的基团，可以与溶质阳离子或氢键基团相互作用，称为亲硅羟基效应或二次相互作用。双保留机理决定了溶质的保留值应包括两部分的贡献：疏溶剂效应和亲硅羟基效应。在大多数情况下，反相键合相表面的残余羟基越少越好，但在一些特殊条件下，残余羟基又起到一定的调节选择性作用，如利用亲硅羟基效应，可以在较少含量的有机溶剂流动相条件下，使溶质的保留值变小。

双标记化合物 double labelled compound 分子中含有两种不同性质

同位素的标记化合物。亦有人将分子中含有两个同种同位素标记的化合物也称为双标记化合物。

双波长分光光度法 dual-wavelength spectrophotometry 简称双波长法。需利用双波长分光光度计来实现的一种分光光度法。其原理是：波长分别为 λ_1 和 λ_2 的两束单色光交替地通过同一盛有试样溶液的吸收池，通过在 λ_1 和 λ_2 处测得的吸光度差 ΔA，由朗伯-比尔定律测定试样中被测组分，即

$$\Delta A = A_{\lambda_2} - A_{\lambda_1} = (\varepsilon_{\lambda_2} - \varepsilon_{\lambda_1})bc$$

式中，ε_{λ_2} 和 ε_{λ_1} 分别表示在波长 λ_2 和 λ_1 处待测物质的摩尔吸光系数；b 和 c 分别表示吸收池的光程（cm）和待测物的物质的量浓度。该法成败的关键是 λ_2（通常称测定波长）和 λ_1（通常称参比波长）的组合和选择。一般可选择被测物质的吸收峰作测量波长，而参比波长的选择则应根据不同的情况而确定。对混浊试样，参比波长一般可在波形平缓处选择；当存在另一干扰组分时，参比波长可选择在干扰组分的等吸收光度点处，这种双波长法称等吸收双波长法；在对单组分显色络合物进行测定时，可选择试剂峰波长为参比波长，这种双波长测定方法又称为双峰双波长法，可在一定程度上提高测定的灵敏度。双波长法消除了传统单波长分光光度法中制备参比溶液及因样品池和参比池不匹配而引起的误差；可用于浑浊试样以及两个相互干扰组分体系的同时分析，在某些情况下若结合 K 系数法（或称系数倍率法）还可用于三组分干扰体系的分析；若将双波长光度分析原理引入导数光谱分析，在干扰组分导数光谱上找出等导数值的两个波长，也可有效消除干扰，并因导数正负的差值，可提高测定灵敏度。

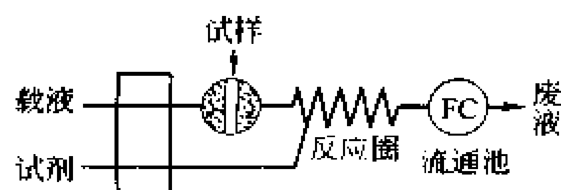
双波长 *K* 系数分光光度法 dual-wavelength *K*-factor spectrophotometry 在某些双波长分光光度法测量中，选择干扰组分的等吸收参比波长有一定困难（如干扰组分无明显吸收峰时），这时可选择一个合适的波长作参比波长，干扰组分在测量波长和参比波长处有如下关系：$K = \varepsilon_{测}/\varepsilon_{参}$，$K$ 为比例系数。这样引入 K 系数后，便可消除干扰组分的吸光度贡献，这种双波长分光光度法称双波长 K 系数法，有时也称为双波长系数倍率法（coefficient multiple spectrophotometry）。它是一种较为基础而又能解决简单干扰体系的一种分光光度法，能较好解决波谱重叠的双组分的分析。在某些特殊情况下，如两个干扰组分的波谱存在两个成比例的吸光度交点，则此法可用于三组分的测定。将经典的双波长 K 系数法扩展为多个波长，可以用于存在两个以上干扰组分的分析，而无需复杂的计算，K 系数确定之后，只需将试样在几个波长处的吸光度值代入相应的等式，即可得待测组分的浓度，这种扩展的方法一般称为多波长 K 系数法（multiple-wavelength *K*-factor spectrophotometry）。

双侧置信区间 two-sided confidence interval 设置在被估参数两侧的置信区间。允许估计值在被估参数大或小的两侧的置信限内变化，如 n 次测量的平均值为 $\bar{x}$，标准偏差为 S，则总体平均值 μ 的双侧置信区间表示为 $\mu = \bar{x} \pm t\dfrac{S}{\sqrt{n}}$，式中，$t$ 是置信系数，可由统计手册中查到，其值与约定置信水平和测定次数有关。

双重氮联苯胺 bis-diazotized benzidine 可同时连接数个蛋白分子的2价偶联剂。在间接血凝试验中用于连接抗原和红细胞。

双重态 doublet 当原子或分子只含有一个未偶电子$\left(S=\dfrac{1}{2}\right)$时，其自旋多重度 $2S+1=2$，称之为具有自旋双重态。绝大多数的自由基均为双重态，某些金属离子（如 Cu^{2+}）也是双重态。

双道流路 two-line manifold 样品以初始浓度 c_S^0 注入到惰性载流中，然后与初始浓度的试剂流（c_R^0）汇合；检测器对分散了的样品带产生响应。在分散了的样品带产生浓度梯度的同时，试剂浓度一直保持不变。特别适合于用有色试剂的场合。将试样注入到惰性载流的做法也适用于多道和多汇合点系统。如下图。



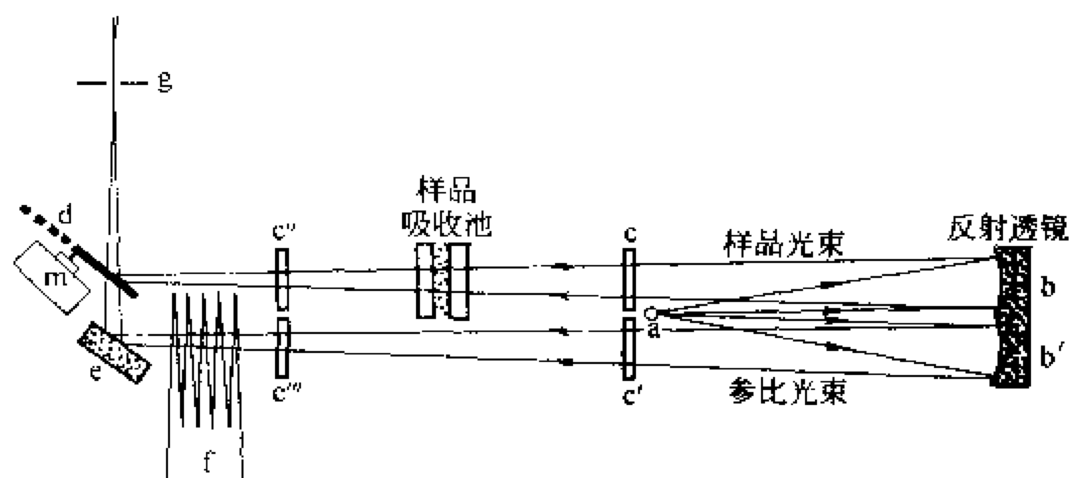
双电层 electrical double layer 在两相之间的分离表面由相对固定和游离的两部分离子组成的、表面电荷异号的离子层。是浸没在液体中的物质表面具有的一种特性。

双电层电流 double-layer current 又称充电电流（charging current）或电容电流（capacity current）。是与电极-溶液界面双电层充电有关的非法拉第电流。

双电层电容 double layer capacitance 把电极的双电层看作一个电容器，由双电层紧密层和分散层两个电容相串联。可根据双电层电容的变化研究电双层的结构和离子或分子在电极上的吸附。

双共振 double resonance 一个由两个或两个以上的耦合核组成的系统，或有耦合关系的两个自旋系统，在激发一个核或一个自旋系统的同时观测另一个核或自旋系统的跃迁，使两个核或两个自旋系统同时发生共振的现象。此时谱仪必须具备两个射频发射系统。双共振有许多种类：核磁-核磁双共振；自旋回波双共振；电子-核双共振；核磁-核电四极双共振；光磁双共振等。同时发生的两个都是核磁共振即为核磁-核磁双共振。

双光束光零点红外分光光度计 double beam optical-null infrared spectrometer 一种使用最方便的色散型红外分光光度计。双光束光学零点平衡的光路如下页图所示。来自光源 a 的红外光通过反射镜 b, b′分为两束等强度的光，样品光束通过样品吸收



双光束红外分光光度计光路图

池，参比光束通过样品室的参比口 c'-c'''，减光器 f 及平面反射镜 e。d 是半圆形切光镜，马达 m 以恒速旋转，使样品光束和参比光束沿同一光路交替射入单色器入射狭缝 g。减光器 f 是一梳状挡板，在参比光路中的位置决定了参比光束的衰减程度。当两束光强度不相等时，在检测器上产生一交流信号。信号强度正比于两光束的强度差。经过放大、滤波、相敏整流等一系列电子线路，驱动伺服马达，使减光器位置移动，直到两束光强相等。这时检测器不输出交流信号，伺服马达停止运动。在此减光器的位置给出样品的透光度。此种仪器的优点是基线平稳，CO_2 和 H_2O 的强吸收可以对消。缺点是记录光强差值信号，仪器性能改变不易被发现。

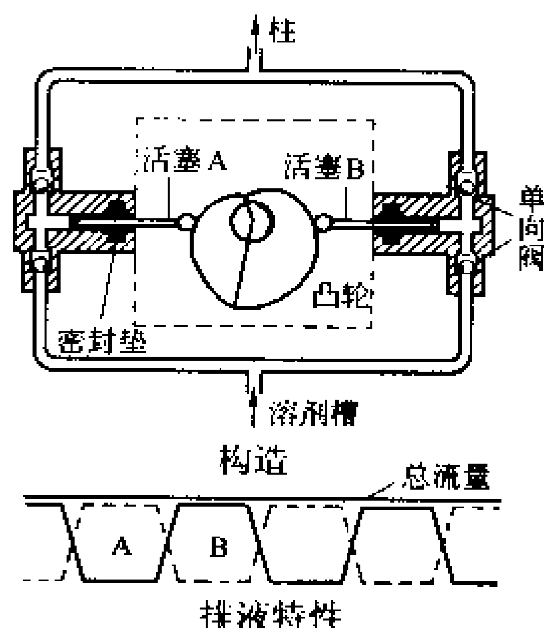
双光束原子吸收分光光度计 double-beam atomic absorption spectrometer 来自辐射光源的光束被分成两光束的一种原子吸收分光光度计。来自空心阴极灯的特征辐射被旋转扇形板分成样品光束和参比光束。样品光束通过原子化器，产生被测元素的共振吸收，参比光束不通过原子化器，经反射镜反射后直接投射到半透射半反射镜，再与样品光束会合，然后经同一光路交替地通过分光系统，进入检测器，分别为检测器所检测，经检波、放大和数据转换，在读数装置上显示吸光度值或直接显示浓度值。它能克服基线漂移，改善信噪比，降低检出限。使用时，辐射光源无需预热。

双光子光谱 two-photon spectroscopy 以频率为 ν 的强光照射物质，物质吸收或发射 $2h\nu$ 的能量；或以 ν_1 及 ν_2 两种频率的光照射物质，物质吸收或发射 $h\nu_1+h\nu_2$ 的能量，利用这种跃迁方式的光谱法称为双光子光谱。广义而言，如拉曼效应，吸收 $h\nu_1$ 的光，发射 $h\nu_2$ 的光，其余跃迁至能量等于 $h(\nu_1-\nu_2)$ 的高能级。双光子跃迁的选律与单光子不同，允许同样对称性能级间的跃迁，因此可用来研究

单光子跃迁禁阻的能级。此外，若以左右反平行的圆偏光作为入射光照射并观察双光子吸收时，因是逐次吸收左右各一个光子，一级多普勒效应被抵消，可以获得无多普勒变宽的尖锐双光子线光谱，这种方法称为无多普勒效应双光子光谱（Doppler-free two-photon spectroscopy）。由双光子跃迁产生的激发态发射的荧光称为双光子荧光。由双光子跃迁产生物质离子化的过程称为双光子离子化，如果分子解离则称为双光子解离。吸收或发射双光子以上的多个光子的光谱法称为多光子光谱。

双弧光法 double arc light method 双弧光法是弧光光源直立电极进样法中的一种。将装有大量样品（≥500mg）的杯形石墨电极，置于上下电极之间。杯形电极和上下电极之间的预热弧光加热石墨杯的底部，使试样蒸发。此方法可以有效的控制蒸发过程和激发过程，增强杂质和基体的分馏效应，降低易挥发元素的检出限。

双活塞往复泵 two-piston reciprocating pump 具有两个活塞的高压输液泵。其结构如右图所示，它有一个精心设计的偏心凸轮，用同步电机或变速直流电机驱动偏心凸轮，偏心凸轮再推动两活塞作往复运动。偏心凸轮短半径端所对应的活塞向外伸，使该活塞的下单向阀打开吸入流动相，与此同时，偏心凸轮的长半径端所对应的另一活塞被推入，使其上单向阀打开，并将流动相送至色谱柱。于是，两活塞交替伸缩，往复运动，就能避免单活塞泵液流脉冲的问题。双柱塞往复泵的输液流量比单活塞泵小得多。其优点是不必使用消除脉冲的阻尼器，避免了阻尼器的压力消耗，但缺点是设备成本较高，流量调节也比单活塞泵复杂。



双基 biradical 又称双基自由基。是由两个各具有一个未偶电子的分子碎片相连而成，其特征是两个分子碎片中的未偶电子存在交换耦合。对于强耦合或快交换，双基的基态可为单重态或三重态；如为弱耦合或慢交换，单重态及三重态几乎是简并的，其ESR谱是由两个无关的自由基的谱所构成。

双晶形貌术 double crystal topography 利用两块晶体相继的布拉格反射而获得第二块晶体的形貌图的方法。双晶技术研究晶体的完整性有两种工作模式：第一种模式是X射线经过高度完整的参考晶体单色化后，入射到第二块晶体，而第二块晶体（样品）则在布拉

格位置附近摆动，从测得的衍射轮廓线推衍出形貌图；第二种模式是用第一块晶体单色化后的X射线作为入射线，采用反射或透射法获得第二块晶体的形貌图。前者可称为双晶衍射仪，后者则为双晶形貌相机。所得的形貌图称为双晶形貌图。双晶技术对于点阵参数的缓慢变化很敏感，能得到高分辨率的缺陷像。

双聚焦质谱仪 double-focusing mass spectrometer 使用电场（E）与磁场（B）组合的方式，同时对离子束进行速度聚焦和方向聚焦的质谱仪。在双聚焦质谱分析中，以电场-磁场的顺序进行配置的称为正配置（forward geometry，EB geometry），而以磁场-电场的顺序进行配置的称为反配置（reversed geometry，BE geometry）。分辨率比单聚焦质谱仪高。

双链 DNA duplex DNA 两条互补单链 DNA 形成的双链 DNA。DNA 双螺旋或 RNA 分子内部因存在碱基配对而折叠成突环的部分都称为双链。

双量子滤波相关谱 double quantum filtered correlation spectroscopy；DQF-COSY 脉冲序列为$\frac{\pi}{2}-t_1-\frac{\pi}{2}(\phi_1)-\Delta-\frac{\pi}{2}(\phi_2)$－采集FID（$\phi_R$）（$t_2$）。它在COSY脉冲序列基础上插入了一个很短的固定延迟Δ（10μs以内，用以产生相移）以及$\frac{\pi}{2}$（ϕ_2）脉冲，将演化期产生自旋系统所有可能的相干转变成为可观测的单量子跃迁后进行检测。利用不同阶数的多量子跃迁的相位不同，可以有选择性观察某阶量子跃迁的传递，此即多量子滤波的原理。双量子滤波 COSY 谱是多量子滤波 COSY 谱中的一种，经相循环将单量子相干滤去，只保留双量子和双量子以上的相干，同时减弱对角线上谱峰的强度，以利于解析对角峰附近的小交叉峰。由于对角峰和交叉峰均为吸收型，所以分辨率较高。DQF 法可有效地抑制强单峰和溶剂峰，检测 AX 或 AB 等二自旋及多自旋体系；三量子滤波可滤掉单峰，溶剂峰和二自旋体系的耦合峰，检测的是三自旋以上的多自旋体系。

双量子相干 double-quantum coherence 见相干条。

双量子跃迁 double-quantum transition 见交叉弛豫条。

双硫腙 dithizone 1,5-二苯基硫卡巴腙，又称二苯硫腙。蓝黑色粉末，分子量 256.36。易溶于三氯甲烷、四氯化碳，稍溶于醇，不溶于水。一种重要的测定 Ag（Ⅰ）、Bi（Ⅲ）、Cd（Ⅱ）、Co（Ⅱ）、Cu（Ⅱ）、Hg（Ⅱ）、Pd（Ⅱ）、Zn（Ⅱ）、Ni（Ⅱ）、In（Ⅲ）、Tl（Ⅲ）、Sn（Ⅱ）的光度显色剂，亦可用作这些离子的螯合萃取剂。

双脉冲场梯度自旋回波法-核欧沃豪斯效应谱 double pulsed field gradient spin echo method and NOE spectroscopy；DPFGSE-NOE 一种将脉冲场梯度及自旋回波技术来获得核欧沃豪斯效应（NOE）谱，相位无畸变。该技术将最有可能取代传统的NOE差谱。

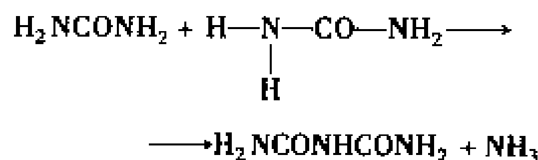
双闪耀光栅 blazed grating with two

blazing wavelength 一般的闪耀光栅微观线槽形状是由相对于光栅表面倾斜 ε 角（闪耀角）的长工作面和短工作面构成的折线锯齿形，可以对相应的闪耀波长（λ_b）发生闪耀。在很多工作波长范围大的光谱仪器（如 UV-VIS 分光光度计、某些红外分光光度计）中，为了能在较大工作波长范围长、短波长两端光能量下降不致太多而获得足够高衍射光信号，往往不得不采用 2 块（或 3 块）闪耀波长不同的闪耀光栅，在不同波长范围交替工作，不但在光栅转换机构方面增加麻烦，而且使用也不方便。双闪耀光栅就是为此开发的折面长工作面光栅。其栅线微观形状是由倾斜角不同（ε_1 和 ε_2）的长工作面与短工作面构成的折面锯齿形，因而可对两个不同的波长 λ_{b_1}、λ_{b_2}（对应于不同的闪耀角 ε_1 和 ε_2）发生闪耀；适当选择 ε_1 和 ε_2 角，就可使整个较大工作波长范围内处于适当位置的 λ_{b_1} 和 λ_{b_2} 先后发生闪耀，最终效果可使较大工作波长范围两端的光效率曲线下降减慢（代价是中间波长范围光效率略有下降），从而用一块双闪耀光栅就可覆盖较大的有用工作波长范围。

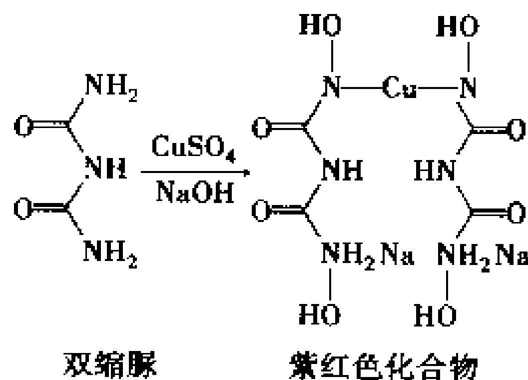
双束差分检测器 detector of dual-beam difference 是基于溶液组成或浓度变化的折射率检测的一种检测器。由透镜聚焦的激光束通过瓦拉斯特棱镜将光束分为两束，然后用透镜聚焦入射于毛细管上，投射光束用刀片挡去一半后投射到同一光二极管的不同部位上，当没有样品时，调节两束光在光二极管的部位，使其光电流完全相等，差分电流信号为零。然后，将一束作为信号束，另一束作为参考束，进行差分测量。

双水相萃取 aqueous two-phase extraction 1896 年由 Beijerinck 最早观察到。该法涉及两个水相，如以聚丙烯乙二醇和磷酸钾等盐类水溶液所构成的双水相萃取体系。主要有四类，即聚合物-聚合物-水、高分子电解质-聚合物-水、高分子电解质-高分子电解质-水、聚合物-低分子量组分-水。优点是能防止生物制品萃取后处理过程中蛋白质变性或酶失活，消除了有机溶剂对蛋白质或酶制剂的有害作用。

双缩脲法 biuret method 一种快速比色测定蛋白质总量的方法。当小心地将脲加热至 150～160℃ 时，可由两个分子间脱去一个氨分子而生成二缩脲（也叫双缩脲）



双缩脲与碱及少量硫酸铜溶液作用发生双缩脲反应，生成紫红色的配合物，最大吸收波长为 560nm。



双缩脲　　紫红色化合物

蛋白质分子中的肽键（—CO—NH—）与双缩脲结构相似，也能发生此反应生成紫红色配合物，基于此反应可用比色法来测定蛋白质含量。

双缩脲反应 biuret reaction 是肽和蛋白质所特有的、而为氨基酸所没有的一种颜色反应。一般含有两个或两个以上的肽键化合物与硫酸铜在碱性溶液中都能发生双缩脲反应，生成紫红色或蓝紫色的复合物，基于这一反应用分光光度计可以测定蛋白质的含量。

双通道原子吸收分光光度计 double-channel atomic absorption spectrometer 使用两个辐射光源、两个分光系统和两个检测器、能同时测定两个元素的原子吸收分光光度计。由于被测定的两个元素的原子化条件不尽相同，有时甚至差别很大，特别在火焰原子化器中，两元素的原子沿火焰高度的分布不同，很难使测定两元素的条件同时达到最优化。如果使用多道原子吸收分光光度计对多元素进行同时测定，要是所有元素的测定条件同时达到最优化就更困难。

双同位素稀释法 double isotppe dilution method 同位素稀释法中的一种。它是将等量已知放射性活度为 A_0 的放射性同位素指示剂溶液，分别加到两份含有相同量 W_x 的被测元素的试样溶液中，在其中一份试液中加入已知量 W_1 的稳定同位素，在另一份试液中加入已知量 W_2 的稳定同位素，分别测定两份试液的放射性比度

$$S_1 = \frac{A_0}{W_x + W_1} \text{和} S_2 = \frac{A_0}{W_x + W_2}$$

由此可以求出试液中被测元素的含量

$$W_x = \frac{S_2 W_2 - S_1 W_1}{S_1 - S_2}$$

双线法校正背景 double line method for background correction 又称为邻近非吸收线校正背景法。利用分析线邻近的非吸收线校正背景的方法，是 1964 年由斯拉文（W. Slavin）提出来的。用分析线测量原子吸收与背景吸收的总吸光度，用邻近分析线的非吸收线测量背景吸收（不产生原子吸收）的吸光度，两次测得的吸光度相减即得到校正背景吸收后的净原子吸收的吸光度值。因为背景吸收随波长而改变，该法校正准确度较差，要求所选用的非吸收线距分析线，在 <200nm 波段区小于 5nm，在 >200nm波段区小于 20nm。用该法校正背景，需使用双通道仪器，或更换波长，进行第二次原子化操作，不仅操作麻烦，而且前后两次原子化操作不易很好地重复，校正效果较差。该法不能校正结构背景，只适用于分析线附近背景分布比较均匀的场合。

双线性旋转去耦（BIRD）脉冲序列 bilinear rotational decoupling（BIRD）pulse sequence 脉冲序列为

^{1}H 核 $90^\circ_x - \tau - 180^\circ_x - \tau - 90^\circ_x$ - 观测

^{13}C 核 ——— 180°_x ———

当 $\tau = \frac{1}{2\,^1J_{CH}}$ 时，利用它可区分直接与 ^{13}C 相连的氢和直接与 ^{12}C 相连的氢的磁化矢量，可区分直接与 ^{13}C 相

连的[1]H 和间接与[13]C 相连的氢（通过$^nJ_{CH}$，$n>1$）的磁化矢量。

双向扩散试验 double diffusion test 与抗原抗体沉淀反应的凝胶扩散试验之一，用于抗原或抗体的定量或定性。双向扩散试验有在试管内进行的一维法和在平板上进行的二维法（又称 Ouchterlony 氏法）。二维法是在平面上造成琼脂的凝胶，开几个小洞，分别注入抗血清或抗原液，从对方扩散开来，并在浓度比适当的（最适比）地方形成沉淀线。

双向展开法 two-dimensional development method 在纸色谱法或薄层色谱法中，当被分离的样品比较复杂时，如既含有不同类别又含有同系物的样品，可采用双向展开法，以获得最佳的分离效果。双向展开法是将混合物样品点在纸和薄层板的某一方向的端部进行展开，待展开剂干燥后，再在垂直于第一次展开的方向上用另一种不同的展开剂进行第二次展开，称这种展开方式为双向展开法。

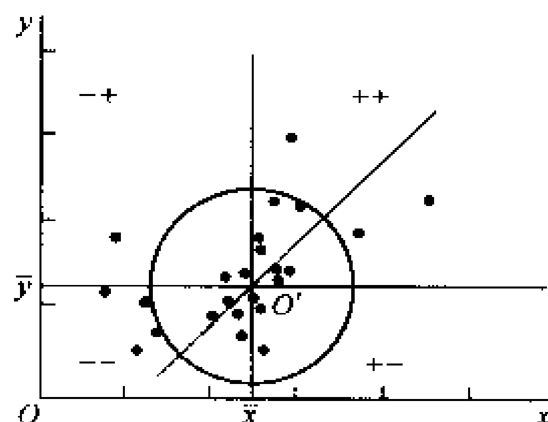
双样品法 double samples method 通过分析两个样品来评价分析质量的方法。将两个组成很相似的样品 A 和 B 分发给参与质量评价的各个实验室或各个分析人员，每个实验室或分析人员分别对样品 A 和 B 各进行一次测定，测得的特性量值分别为 x_{i1} 和 x_{i2}，$i=1, 2, \cdots, n$。因 A 和 B 样品很相似，如果存在系统误差，则测定值 x_{i1} 和 x_{i2} 具有方向和大小相同的系统误差，其差值 $d_i=x_{i1}-x_{i2}$ 将使系统误差相互抵偿，而只存在随机误差，$S_e=\sqrt{\dfrac{\sum(d_i-\bar{d})^2}{2(n-1)}}$；其和值 $t_i=x_{i1}+x_{i2}$ 既存在随机误差，又存在系统误差，总标准差

$$S_t=\sqrt{\frac{\sum(t_i-\bar{t})^2}{2(n-1)}}$$

如果存在的系统误差相对于随机误差可以忽略不计，S_t^2 和 S_e^2 则为同一方差的估计值，则 $F=S_t^2/S_e^2$ 接近于 1。如果 F 比 1 大得多（大于一定显著性水平的临界值），表明存在系统误差，其大小为

$$S_b=\sqrt{(S_t^2-S_e^2)/2}$$

双样（品）图 double samples plot 通过分析两个样品来评价分析质量的质控图。将两个组成最好相似的样品 A 和 B 分发给参与质量评价的各个实验室或各个分析人员，每个实验室或分析人员分别对样品 A 和 B 各进行一次测定，测得的特性量值分别为 x_i 和 y_i，组成一个实验点（x_i，y_i）。将所有实验室或分析人员的实验点绘制在 x-y 坐标图上，如下图。如果各实验室或分析人员的测定结果没有系统误差，各实验点将随机地分布在以



分别通过$\bar{x}$和$\bar{y}$、并平行于x和y坐标轴两条直线相交分割而成的＋＋、＋－、－＋、－－四个象限内，并聚集在以（$\bar{x}$，$\bar{y}$）为圆心，一定置信水平下的随机不确定度为半径的圆形区内。如果存在系统误差、测定结果偏高或偏低，实验点将主要沿着与y轴成45°方向呈椭圆形分布在＋＋和－－两个象限内。根据双样图可以对各实验室或分析人员的分析质量作出科学的评价。

双折射 birefringence 自然界中存在一些光学性质随方向而变化的透明晶体，可以使一束入射光通过时产生两束分离的折射光，这种现象称为双折射，能产生双折射的各向异性晶体称为双折射晶体。例如在书上放一块方解石晶体，可以看到一行字变成两行。除了自然晶体以外，不少人工制备的光学异性介质也具有双折射性质。

双柱定性法 double-column qualitative method 色谱分析中常用的一种定性方法。它是依据各类同系物在具有不同极性（或氢键缔合能力）的两根色谱柱上，其比保留体积V_g的对数呈线性关系，如下式

$$\log V_g^{\mathrm{I}} = A\log V_g^{\mathrm{II}} + C$$

式中，A、C为有关官能团特征的系数；Ⅰ，Ⅱ分别表示Ⅰ号柱和Ⅱ号柱。应用此法定性时，将未知组分分别在所选的两根色谱柱上进行测定，得到保留值的对数，对照已有同系物的对数曲线，即可推测出未知物的性质，必要时可与标准物质在两柱上的保留值进行对比。

双柱离子色谱法 dual column ion chromatography 又称抑制型离子色谱法。是在分离柱之后连接抑制柱（或其他类型抑制器）的离子色谱法。参见**抑制型离子色谱法**条。

双柱色谱法 dual column chromatography 当采用单一色谱柱无法分离样品中的待测组分时，就将两根不同性质的色谱柱串联或者并联起来使用，以实现难分离组分的分离。

水表面微层 surface microlayer; SM 水表面100μm厚的水层。系富集了各种化学物质具有特殊物理、化学和生物性质的界面。大气和水间的物质和能量交换亦通过此界面进行，该界面交换过程在环境及物质的地球化学循环中起着极重要的作用。SM还是生物栖息、生长、繁殖的特定场所，它们必然受到此微层中较高浓度污染物质的作用，并产生各种毒性效应。

水表面微层采样器 sampler of water in surface microlayer 表面微层水样系用玻璃刮板采样法采取，采样厚度一般为60～80μm。玻璃刮板是专门设计的三面有边框（高度在100μm内）的玻璃板。

水采样 water sampling 采集受污染水体的水样，通过分析测定，以获得水体污染的基本数据。供分析用的水样应具有代表性，能反映水体的化学组成和特征。采样的方法、位置、时间、次数等都是根据水体特点和分析目的决定的。

河水采样：一般在水文站测流断面中泓水下面 0.2～0.5m 采取，断面开阔时应当增加采样点。岸边采样点须设在水流通畅处。必要时还可以在不同深度分层取样。采样次数根据水情变化，均匀分布于不同时期和不同流量。丰水期、平水期、枯水期均应布设测次。

海水采样：一般在海洋调查过程中进行采样，有大面观测、断面观测和连续观测三种基本方式。大面观测是在调查海区布设若干个采样点，在一定时间内同时采样。断面观测是在调查海区布设几个有代表性的断面，在断面上布设若干个采样点，在一定时间内各点分别采样。连续观测是在调查海区布设有代表性的测站，根据任务要求按一定时间间隔连续采样 1d 以上。

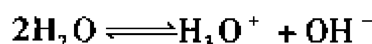
湖水采样：在水面开阔的湖泊和水库的采样，可仿照海水采样方式进行。浅的湖泊或水库可设桩固定测船，定期采样。在进出水道的控制断面设置采样垂线或采样点。水库还应考虑水库运转的特点。

水采样器 water sampler 采集水体表层水样时可用专用器皿或水盆、吊桶等。采集深层水样用不同形式的带有测深设置的采样器。陆地水体的水质采样器多为瓶式，由采水容器和输水管道、测深绳索等组成。深层海水的采样有多筒采样器、绝缘采样器和颠倒式采样器。其采水容器多为金属铜管，内壁镀贵金属，以避免因腐蚀而影响水样的化学性质。一般需在容器内壁加环氧树脂、聚四氟乙烯或尼龙涂层，最好用聚四氟乙烯或聚乙烯塑料或玻璃的采水容器。

水产品鲜度评价 evaluate of aquatic product fresh 新鲜度是决定水产品质量的重要因素，与水产品死亡后体内发生的一系列生物化学变化和细菌繁殖有密切的联系。水产品的鲜度可用氨离子选择电极、酶传感器和微生物传感器来评价，但以气味浓度测量仪对被检样品进行气味测量这种方法更为简单、快捷。气味浓度测定仪（例如日本 B & HLBAO. Co. Ltd 公司生产的 Alabaster-Mini EKW-M89）的测量原理是：水产品死亡后肌肉组织中的氨基酸经微生物脱羧基作用后产生胺化合物，它再转变成氨，以测量氨的浓度来确定鲜度。气味测量仪可直接测定产生的氨量，并以数字将浓度直观地表示出来。例如，对虾的气味数据在该仪器上的读数：一级新鲜度为 $\leqslant 1.8\times10^3$，二级新鲜度为 $\leqslant 2.3\times10^3$，腐败为 $>2.3\times10^3$。

水的离子积 ionic product of water；K_w 亦称水的质子自递常数（参见**质子自递常数**条）。水溶液中 H^+ 离子活（浓）度和 OH^- 离子活（浓）度的乘积，用 K_w 表示。K_w 随温度而变。水是弱电解质，产生质子自递部分电离为 H^+ 和 OH^-。

$$2H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$$



$$K=\frac{a_{H_3O^+}\times a_{OH^-}}{a^2_{H_2O}}$$

纯水和稀溶液中水的活度是一常数，

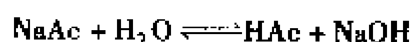
约为 55.55mol·L^{-1}，25℃时，经测定纯水中 H^+ 和 OH^- 活度各为 1.004×10^{-7}mol·L^{-1}，即

$$K_w = a_{H_3O^+}\,a_{OH^-} = 1.008\times10^{-14}$$

忽略离子强度影响，$a_{H_3O^+}\,a_{OH^-}\approx[H^+][OH^-]$，$K_w\approx[H^+][OH^-]$。室温下，通常取 $K_w=1\times10^{-14}$。K_w 反映了一定温度条件下水中 H^+ 和 OH^- 浓度之间的关系。当温度一定时，任何一种稀溶液中的 H^+ 和 OH^- 都服从水的离子积公式。通过 K_w，已知 $[H^+]$，即可求 $[OH^-]$，反之亦真。

水分保持剂 humectants 有助于维持食品中的水分稳定而加入的物质，多指用于肉类和水产品加工中增强水分稳定和有较高持水性的磷酸盐类。我国规定许可使用的水分保持剂有：磷酸三钠、六偏磷酸钠、三聚磷酸钠、焦磷酸二氢钠、磷酸氢二钠、磷酸二氢钙、焦磷酸二氢二钠、磷酸氢二钙、磷酸氢二钾、磷酸二氢钾等 10 种。

水解 hydrolysis 物质与水反应而发生的分解作用。通常指盐类的水解，即盐的离子与水反应生成弱电解质的反应。例如

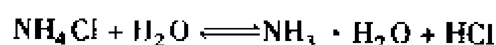


$$NaAc + H_2O \rightleftharpoons HAc + NaOH$$

离子方程式：

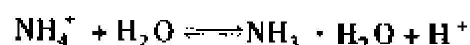


$$Ac^- + H_2O \rightleftharpoons HAc + OH^-$$

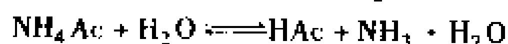


$$NH_4Cl + H_2O \rightleftharpoons NH_3\cdot H_2O + HCl$$

离子方程式：

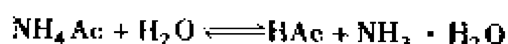


$$NH_4^+ + H_2O \rightleftharpoons NH_3\cdot H_2O + H^+$$



$$NH_4Ac + H_2O \rightleftharpoons HAc + NH_3\cdot H_2O$$

离子方程式：



$$NH_4Ac + H_2O \rightleftharpoons HAc + NH_3\cdot H_2O$$

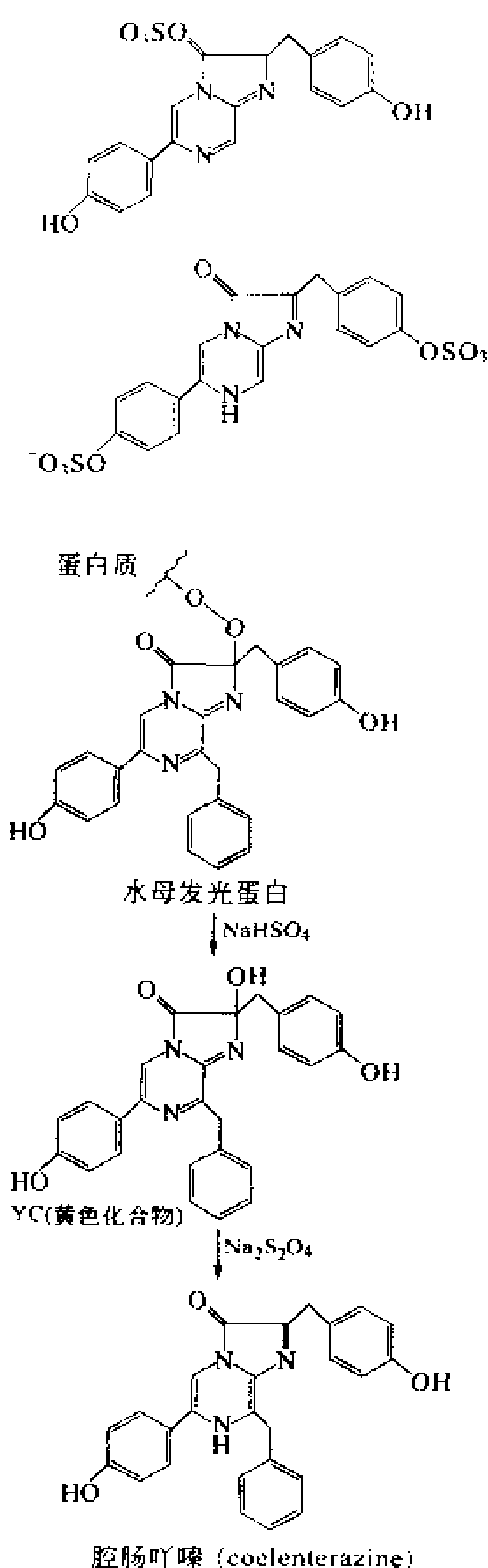
从上例可知，弱酸强碱盐水溶液呈碱性；弱碱强酸盐水溶液呈酸性；弱碱弱酸盐水解后溶液酸碱性则取决于水解产物的相对强弱。由于形成盐的酸和碱的强弱不同，各种盐类水解进行的程度各有差异，即盐类的水解主要决定于盐的本性，亦受温度、浓度的影响。

水解性氮素的测定 determination of hydrolysable nitrogen 土壤水解性氮亦称土壤有效氮，它包括无机的矿物态氮和部分有机物质中易分解的、比较简单的有机态氮，它是铵态氮、硝态氮、氨基酸、酰胺和易水解的蛋白质氮的总和。水解性氮的含量与有机质含量及质量有关，有机质含量高，熟化程度高，有效氮含量就高，土壤水解性氮的测定方法有碱解扩散法和酸解法。

水冷炬管 water-cooled torch tube 即用水冷却炬管，其中用水量应超过一定的最小量以免在环绕 ICP 炬管的水套中形成气泡。

水母发光蛋白 jellyfish luminescent protein 水母是一种典型的腔肠动物，会发光。人们很早就试图从水母中分离出发光物质，但一直没有成功，直到 1962 年才分离出一种蛋白质，该蛋白质经 Ca^{2+} 离子处理后会发出亮光。这是人们发现的第一个发光蛋白质，称之为水母发光蛋白。人们对其水解产物的结构进行研究，发现其活性结构与腔肠动物荧光素有关，其杂环部分的结构以磺酸酯的形式存在。

虽然 Ca^{2+} 对荧光素-荧光素酶生物发光体系有催化作用，但是该发光反应仍需要氧的参加。就水母发光蛋白而言，它需要寻找一个途径使氧能够键合上去。光谱学研究证明，腔肠吖嗪（coelenterazine）的各种异构体是通过氧结合在一起的。在没有辅助因子存在的情况下，氧能够将它们结合在一起的惟一途径是通过过氧化物的生成。当水母发光蛋白被 $NaHSO_3$ 还原时会生成一种黄色的化合物（YC），当其进一步被 $Na_2S_2O_4$ 还原时就会生成腔肠吖嗪，其反应如右图。



腔肠吖嗪（coelenterazine）

水凝胶　hydragel　硅酸在常温下脱水得到的产物。

水平对称平面光栅装置　horizon-symmetric plane grating mounting　入射狭缝和出射狭缝的中心与平面光栅中心在同一水平面上、并对称分置光栅两侧的平面光栅装置，也称为 Fastie-Ebert 系统。由于水平对称，光学对称性好，所以残余像差小、成像质量好，是高质量平面光栅单色仪最常用的装置，如果采用适当弯曲在 Ebert 圆上的弯曲的入缝和出缝，像散和谱线弯曲的影响也大大减轻，成像质量更好；水平对称平面光栅装置的最大缺点是存在二次色散现象，而且系统不紧凑、仪器占用实验台面积大。

水平数　number of level　因素所处状态的数目。在设计试验时，将欲考察的因素取多个不同的值（水平），以研究因素水平变化对试验指标的影响。

水溶性酸或碱 water soluble acids or alkalis 存在于油品中可溶于水的酸性或碱性物质的总称。由于油品中有水溶性酸或碱存在时会严重腐蚀机件，故在油品中是不允许有水溶性酸或碱存在的，但对加有分散添加剂的柴油机油和汽油机油是允许呈碱性反应的。油品中有水溶性酸或碱时，在大气中的水分、氧气的作用及受热情况下，会促使油品老化。以蒸馏水或乙醇水溶液抽提试样中的水溶性酸或碱，用酸碱指示剂检查或用酸度计测定抽提液的 pH 值，判断油品中有无水溶性酸或碱的存在。

水体富营养化监测 eutrophication monitoring of water body 水域富营养化是指由于人为原因使过量的氮、磷等营养物质排入缓流水体（湖泊、水库、河口、海湾等），引起水体水质恶化的现象。为了研究这种污染，需要对其进行监测。主要的监测方法有：(1) 指标生物调查法；(2) 溶解氧测定法；(3) 生物现存量调查法（叶绿素量等）；(4) 光合作用能力测定法；(5) 透明度测定法；(6) 氮、磷等营养盐浓度测定法。通过上述方法的组合就可以充分掌握富营养化的现状。

水体自净 self-purification of water body 广义的是指受污染的水体由于物理、化学、生物等方面的作用，使污染物浓度逐渐降低，经一段时间后恢复到受污染前的状态；狭义的是指水体中微生物氧化分解有机污染物而使水质净化的作用。水体自净机理包括沉淀、稀释、混合等物理过程，氧化还原、分解化合、吸附凝聚等化学过程以及生物化学过程。各种过程同时发生，相互影响，并相互交织进行。一般来说，物理和生物化学过程在水体自净中占主要地位。

水污染常规分析指标 index of routine analysis for water pollution 水体污染会引起水质的恶化。水污染常规分析指标是反映水质状况的重要参数，是对水体进行监测、评价、利用以及污染治理的主要依据。环境保护机构和其他有关部门通常按照不同的要求测定各种水质标准，以及相应的测定方法。水污染常规分析指标主要有以下项目：臭、水温、浑浊度、pH 值、电导率、溶解性固体、总氮、总有机碳、溶解氧、水温、生化需氧量、化学需氧量、细菌总数、大肠杆菌群等。

水污染连续自动监测系统 continuous and automatic monitoring system for water pollution 对污染源排放的废水，以及地表水和地下水被污染的情况进行连续自动采样、测定、传输和数据处理的实时监测网。水污染连续自动监测系统是由若干个水污染固定监测站（可设在河流两岸、湖泊和水库的出入口、工厂废水排放出口、污水处理厂排水口等处），数据通信系统和一个监测中心三部分组成。监测站有连续采样装置、水污染连续监测仪器、水文气象参数测定仪器以及水样存贮装置等。各监测站连续测出的数据，经有线电或无线电通

信系统定时地（例如每小时一次）传送至监测中心。监测中心设有电子计算机和各种辅助设备，以收集数据、处理数据及存储数据，并可向各监测站发出遥控指令。

水污染物 water pollutants 指进入水体后使水体的正常组成和性质发生直接或间接有害于环境及人类的变化的物质。水体污染物的分类方法不一，环境工程学是依污染物质或能量（如热污染）所造成的各类型环境问题以及不同的治理措施对水体污染物类型作如下分类：（1）病原体污染物，即生活污水、畜禽饲养场污水以及制革、洗毛、屠宰业和医院等排出的废水，常含有各种病原体，如病毒、病菌和寄生虫；（2）需氧物质污染物，即生活污水、食品加工和造纸等工业废水，其中含有碳水化合物、蛋白质、油脂、木质素等有机物质，这些物质以悬浮或溶解状态存在于污水中可通过微生物的生物化学作用而分解；（3）植物营养物质污染、石油污染、热污染、放射性污染、有毒化学物质污染及盐污染等。

水污染遥感 remote sensing for water pollution 应用遥感飞机、航天实验室、地球卫星对地面水体和海洋进行遥感监测的技术。此项技术能连续、快速地测定河流、湖泊、水库和海洋的污染特征，依据污染的总体分布和污染源的位置，使用的仪器有红外扫描仪、多光谱扫描仪、微波系统和激光雷达等。水污染遥感是利用水中物质对光波和电磁的发射特性，以及物质本身的热辐射特性来探测飘浮在水面和悬浮于水体中的物质以及某些溶解于水中的混合物的。对于化学污染物可以利用其荧光特性来探测，对于水中的悬浮物质则利用光吸收技术离子探测。红外遥感可测量水温并作出大面积水体等温线图。紫外摄影可侦察水表面的油膜。卫星遥感技术可追踪海上大面积油膜移动的方向。其优点是覆盖面积宽广，有利于大面积的油污染、热污染和污染带的监测，缺点是成本高、能监测的项目较少和尚难准确定量。

水系凝胶色谱柱 aqua-system gel column 适用于水系凝胶色谱（亲水凝胶色谱或凝胶过滤色谱）分离的色谱柱。因为水系凝胶色谱使用的流动相是水或缓冲溶液，所以，要求固定相应该与流动相具有一定亲和性。水系凝胶填料通常是将水溶性聚合物交联后的凝胶微粒，这种填料适合于水溶性合成高分子或天然高分子的分离。

水性油墨的鉴定方法 identification of soluble mimeograph ink 羧基丁苯胶乳既具有丙烯酸酯共聚物的水复溶性，又具有羟基丁苯胶乳的成膜性和皮膜韧性，用它所制成的水性油墨可以成功地用于织物的印刷，但印刷纸品时却表现出耐水性差和光泽不好的缺点。近年来利用粒子设计方法，制成了一种具有核壳型乳胶粒结构的羧基丁苯胶乳，具有良好的成膜性、光泽性和适宜的水复溶性。用这种胶乳配制成的水性油墨印刷的印刷

品光泽性好，粘结牢度高，光反射密度差大，且真实感强。鉴定水性油墨时，先用红外光谱等手段鉴定其主要成分是否为羧基丁苯共聚物，然后测定其水溶性，再鉴定其印刷效果，以确定是否为水性油墨。

水杨酸比色法 colorimetric method with salicylate acid 一种快速测定蛋白质含量的方法。样品中的蛋白质经硫酸消化而转化成铵盐溶液后，在合适的酸度和温度条件下可与水杨酸钠和次氯酸钠作用生成蓝色的化合物，在660nm波长下比色法测定样品中含氮量，可用蛋白质折算系数计算出蛋白质含量。

水硬度 water hardness 反映水的含盐（主要指钙盐、镁盐）特性的一种质量指标。钙盐、镁盐含量高的水称为硬水，含量低的水称为软水。表示水的软硬程度的指标称为水的硬度。水的硬度最常采用EDTA络合滴定法测定。水的硬度有数种表示法，一般是以1百万份水中含1份$CaCO_3$（即$1mg \cdot L^{-1}$）为1度；也有用1L水中含10mg CaO（或7.19mgMgO）为1度等其他表示法。水的硬度又分为暂时硬度和永久硬度两种。前者是指由碳酸氢钙和碳酸氢镁形成的硬度（煮沸时因分解生成沉淀而被大部分除去）；后者是指由钙、镁的稳定的硫酸盐、氯化物和磷酸盐等形成的硬度，煮沸时这部分硬度不能除去。

水蒸气蒸馏 water vapor distillation 一个存在于互不混溶的两相体系中的组分，有可能在低于它的正常沸点的温度下进行蒸馏。这个现象被用于蒸馏相对难挥发的或在高温下易分解的样品。通常使用水作为互不混溶的第二相，所以这个过程称为水蒸气蒸馏，水蒸气从外部通入蒸馏瓶，并且是过量的。蒸馏连续地进行，直到所需蒸馏的样品组分获得纯化为止。如，苯胺沸点高，且易于氧化，常用水蒸气蒸馏提纯。

水质评价指数 water quality assessment index 评价水质的一种指标。是一种以水质的化学监测值为主的监测指标评价方法。一种是单一参数评价法，常用溶解氧（DO）和生化需氧量（BOD）进行评价；另一种是多项参数评价法，即将选用的评价参数综合成一个概括的指数值来评价水质，也叫做指数评价法或数学模式评价法。应用的指数有两种：一种是参数分级评分叠加型指数，如S.L.Ross的水质指数（WQI）选用BOD、氨氮、悬浮固体和DO等项作为评价参数。水质指数的计算公式为

$$WQI = \frac{\sum 分数值}{\sum 权数值}$$

另一种为相对质量叠加型指数，我国在1974年提出水质评价污染综合指数，这类指数已有7、8种。这种类型指数适合评价水质污染。计算方法是选定若干评价参数，将各参数的实际浓度（c_i）和其相对应的评价标准浓度（S_i）相比，求出各参数的相对质量指数c_i/S_i，然后求总和值

$$WQI = \sum \frac{c_i}{S_i}$$

WQI 数值大表示水质差，数值小表示水质好。

水质污染监测 monitoring of water pollution 简称水质监测。指监视和测定水体中污染物的种类、各类污染物的浓度及变化趋势，评价水质状况的过程。监测范围十分广泛，包括未被污染和已受污染的天然水（江、河、湖、海和地下水）及各种各样的工业排水等。主要监测项目可分为两大类：一类是反映水质状况的综合指标，如温度、色度、浊度、pH 值、电导率、悬浮物、溶解氧、化学需氧量和生化需氧量等；另一类是一些有毒物质，如酚、氰、砷、铅、汞、铬、镉和有机农药等。为客观地评价江河和海洋水质状况，除上述监测项目外，有时需进行流速和流量的测定。

水质自动监测系统 water quality automatic monitoring system 是对公共水域或污染源水污染状况进行连续测定和现场实时记录的装置。它一般由取样、测试和信号处理三部分组成。取样通过将传感器与采样器一起直接安装在水体中完成。监测参数通常有水温、流速、流量、pH 值、电导率、溶解氧、铵离子、氯离子、硝酸根、化学需氧量（COD）、总有机碳（TOC）等。传感器随测试的参数不同而不同。信号处理部分主要完成数据采集、传输、显示、记录和储存等功能，可连续自动地进行监测、信号处理和数据传输。

顺磁共振 paramagnetic resonance 见电子自旋共振条、电子顺磁共振条。

顺磁屏蔽 paramagnetic shielding 当核外电子云呈非球形时，此种电子环流产生了各处异性的局部磁场，某种程度上阻碍了电子云的自由转动，或者说在磁场的诱导下使基态电子掺有激发态的成分而导致这种电子屏蔽作用是负的，是顺着外磁场方向（同向）使场强增加，这种屏蔽称为顺磁屏蔽。通常核外存在着 p、d 等非球型电子云以及邻近存在着双重化学键时，对核表现为顺磁屏蔽效应，使核的 NMR 峰移向低场或高频方向。

顺磁性 paramagnetism 介质在外磁场中，沿外磁场方向上有弱的磁化，当除去磁场后磁化消失的磁性称为顺磁性，是弱磁性的一种。具有未配对电子的原子（离子）、分子或者具有开壳层电子结构的原子（离子）、分子中电子磁矩非零，因此都有永久磁矩。这些未配对电子引起的自旋（及轨道）磁矩之间没有相互作用，或者与热运动相比相互作用的能量可以忽略时，这些永久磁矩的取向是混乱的，宏观磁矩为零，不显磁性。当它们在外磁场中则每个磁矩趋向于顺着磁场方向呈一定程度的有序排列，宏观磁矩不为零，起到了加强外磁场的作用，从而使该原子（离子）或分子呈现顺磁性。具有顺磁性的物质称为顺磁物质，其磁化率 χ 为正值。顺磁物质的磁化率一般遵循居里规则随着温度的上升而减小。许

多过渡金属原子（离子）因为核外d、f电子亚层未充满，许多含有自由基或游离基的化合物或处于激发态的化合物为顺磁性物质。

顺序等离子体光谱仪 sequential inductively coupled plasma spectrometer 又称顺序ICP光谱仪，主要功能是在计算机控制下连续地查找分析线峰值并依次测量其强度，它是多元素顺序型分析仪器。全套仪器由高频发生器、单色器、等离子体炬管、进样系统、供气系统、测光装置和计算机组成。

顺序注射分析 sequent injection analysis; SIA 是1990年由茹奇卡（Ruzicka）和马歇尔（Marshall）提出的，系由FIA技术演变而来。首先是将进样阀换成多路选择阀；其次是将普通的蠕动泵改换成注射泵或能正反向旋转的蠕动泵；再就是要在泵和阀之间增加一段储存管。并要求泵和阀必须在微机的统一控制之下自动运作，不能手工操作。阀的公共通道的外端与泵相通，可供选择的通道位置，包括若干试样端、几个试剂端和流通池等。借助泵的抽吸可顺序地从不同通道采集一定体积的试样和试剂的区带到储存管中，然后将这些溶液区带经转移管推送到检测器。其间由于径向和轴向分散，导致区带互相渗透和交融。混合和反应并形成反应产物。在检测器中可得到与FIA中类似的信号。

瞬间离子基体效应 moment ion matrix effect 离子的有效淌度受到周围离子的影响，由其周围离子所形成的包围圈，称为离子基体。如果样品组分从进样点到探测点迁移过程中，在某一时间间隔遇上一个不同组成的基体区带，这个离子基体区带就将对样品组分产生影响，使它们的淌度发生瞬时变化，从而选择性地影响溶质的迁移和分离，这就是瞬时离子基体效应。

瞬时电流 instantaneous current （1）在滴汞电极上，瞬时电流是指从前一汞滴下落的时刻算起，到时间t那个时刻，通过电极的电流。（2）在任何电极上，瞬时电流是指从电解开始的那一时刻算起，到时间t那一时刻，通过电极的电流。

瞬时流速 instantaneous rate of flow 在极谱学中，汞（或其他液态金属的）滴生成后t（s）时刻汞（或其他液态金属的）滴质量的增长速度。

瞬时荧光 prompt fluorescence 与延迟荧光及磷光对应，一般荧光发射是相同多重态间的跃迁，几率很大，速度很快（速率常数为10^6～$10^9 s^{-1}$），故称为瞬时荧光。

斯奈德溶剂强度参数 Snyder solvent strength parameter 物质在固体表面上吸附是一个复杂的过程，涉及各种分子间相互作用。Snyder用一个普遍的方程来表达溶质i在吸附剂与惰性溶剂之间的分配

$$\lg(K_p)_i = \lg V_a + E_a(S^0 - A_s\varepsilon^0)$$

式中，$(K_p)_i$为溶质i在指定的固定相（吸附剂）与惰性溶剂（如正戊

烷）之间分配系数；V_a 为吸附剂体积；E_a 为吸附剂表面活性函数；S^0 是溶质的吸附自由能；A_s 为溶质所需的吸附剂表面积；ξ^0 就是溶剂在指定吸附剂表面上的斯奈德溶剂强度参数。对不同的吸附剂 ξ^0 不同。例如：$\xi^0_{氧化硅} = 0.77\xi^0_{氧化铝}$，$\xi^0_{氧化镁} = 0.58\xi^0_{氧化硅}$，$\xi^0_{白土} = 0.52\xi^0_{氧化铝}$。对氧化铝吸附剂，Snyder 研究了不同溶剂的 $\xi^0_{氧化铝}$，见下表。ξ^0 包含吸附剂与溶剂之间的所有可能的相互作用，是一种溶剂极性大小的标度之一。斯奈德溶剂强度参数广泛用于吸附分离，吸附色谱，TLC 中对溶剂极性的选择。

溶剂	正戊烷	环己烷	CCl_4	1-氯丙烷	苯	二乙醚
$\xi^0_{氧化铝}$	0.0	0.04	0.18	0.30	0.32	0.38
溶剂	氯仿	丙酮	乙酸乙酯	乙腈	异丙醇	甲醇
$\xi^0_{氧化铝}$	0.40	0.56	0.58	0.65	0.82	0.95

斯塔克变宽 Stark broadening 由斯塔克效应引起的谱线变宽。分一级斯塔克变宽和二级斯塔克变宽，二级斯塔克效应不仅引起谱线变宽，还使谱线产生位移。在火焰原子化器、空心阴极灯和无极放电灯中，斯塔克变宽可以忽略不计。

斯塔克效应 Stark effect 在外电场作用下原子或分子的能级产生分裂和移位的现象。1913 年斯塔克在 $10^5 V \cdot cm^{-1}$ 量级的电场中，首先观察到氢原子巴耳末线的明显的分裂现象。电场对氢原子和其他原子的作用是不同的，氢原子的平均电矩不等于零，其光谱线在电场中的分裂源于氢原子的电偶极矩与电场本身的作用，斯塔克效应与电场强度成正比，称为线性斯塔克效应或一级斯塔克效应；其他原子感应电矩不等于零，谱线在电场中的分裂源于电场感生的电偶极矩与电场本身的作用，在电场中的附加能 ΔE 与极化率和电场强度平方成正比，称为平方斯塔克效应或二级斯塔克效应。二级斯塔克效应不仅引起谱线变宽，还使谱线产生位移。

斯托克斯散射 Stokes scattering 当单色光光子与分子相互作用时，若发生非弹性碰撞，光子与分子之间发生能量交换，光子不仅改变了运动方向，同时还发生光子的一部分能量传递给了分子，转变为分子的振动或转动能，由此光子的频率相应地减小，这种散射现象称之为斯托克斯散射。因为这种散射现象是 1928 年印度物理学家拉曼首次发现的，故常称之为斯托克斯拉曼散射，简称拉曼散射。

斯托克斯位移 Stokes' shift 物质中被光激发的电子在从激发态回到基态发光之前，会与周围环境中的原子发生作用，使其激发能的一部分以热或其他形式发生非辐射失活，因此产生能量差。这种激发光与发光之间的能量差称为斯托克斯位移。无斯托克斯位移的共振发光线与斯托克斯线的强度比，取决于激发电子与周围原子（或结晶晶格）相互作用的大小。

斯托克斯荧光 Stokes' fluorescence

由于斯托克斯效应，一般荧光的发射波长总是出现在比激发光更长的波长处（能量更低）。为了与反斯托克斯荧光相区别，将这种荧光称为斯托克斯荧光。参见**斯托克斯位移**条。

死区域 dead zone 指色谱柱填充后在柱管内固定相颗粒间所剩留的空间，亦即流动相所占有的体积。在气相色谱中，这一空间的体积又称为气体滞留量。这些空间在色谱分离中不参与吸附或分配过程，因而称为死区域。死区域的存在影响分离效率，故在计算色谱柱的有效柱效率时必须扣除。

死时间 dead time 计数类检测器在产生一次放电后，恢复到正常接收状态所需要的、极短的时间间隔，在此时间内检测器不能对任何信号产生响应；或者是从进样到检测器产生响应的时间滞后。不同学科领域死时间的含义有所不同。在 X 射线分析中是指 X 射线检测器在接收一个 X 射线光子之后，到能够对第二个 X 射线光子产生响应的时间间隔。盖革计数器、正比计数器、锂漂移硅半导体计数器等的死时间不同。在 NMR 中死时间是脉冲傅里叶变换 NMR 脉冲序列中的一个时间参数。它指每当施加一个脉冲过后接收器因脉冲冲击而产生的阻塞状态恢复到正常工作状态所需的时间，一般需要 5～10μs，有些 NMR 谱仪可达 2μs。在色谱分析中死时间是指不被固定相吸附或溶解的组分在通过色谱柱死体积时所运行的时间。例如在气相色谱中，一般选择空气（或甲烷）作为不被固定相吸附或溶解的组分，测定它从进样开始到柱后出现浓度最大点的时间，死时间也就是空气的保留时间。

死体积 dead volume 以 V_M 表示，是指色谱柱在填充后柱管内固定相颗粒间所剩留的空间、色谱仪中管路和接头的空间以及检测器的空间的总和。当后两项很小可忽略不计时，死体积就是死区域。死体积的测定是选择某一不参与色谱过程的物质（如空气），测定其通过色谱柱后的出峰时间（死时间）。死时间与流动相流速的乘积则为死体积。参见**死区域**条和**死时间**条。

四方晶系 tetragonal system 一种中级晶系，晶体所属点群的特征对称性是在一个方向上具有四重对称轴。四方晶系的晶胞参数之间的关系为 $a=b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$，选取晶胞时应使四重轴平行于 c 轴。四方晶系有两种可能的布拉维格子——四方简单格子和四方体心格子。

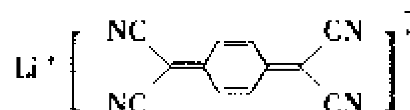
四极杆质谱分析器 quadrupole mass analyzer 一种被广泛使用的质谱仪分析器。由两组对称圆柱形或双曲面形的电极组成。电极上加有直流电压和射频电压 [$\pm(U+V\cos\omega t)$]。相对的两个电极电压相同，相邻的两个电极上电压大小相等，极性相反。带电粒子射入四极杆形成的高频电场中，在场半径限定的空间内振荡。在一定的电压和频率下，只有一种质荷比的离子可以通过四极杆达到检测器，其余离子则因振

幅不断增大，撞在电极上而被“过滤”掉，因此四极分析器又叫四极滤质器。利用电压或频率扫描，可以检测不同质荷比的离子。

四极杆质谱仪 quadrupole mass spectrometer; QMS 质谱仪的一种。它的质量分析器是加了射频电压和直流电压的四极杆。将直流与高频电压施加到具有双曲面或圆柱形的4根平行电极杆上，进入四极杆的离子，在高频电场中振动并向前运动，只有对应于某特定频率的离子振幅合适，最终可以通过四极杆达到检测器而被检测。

四甲基硅(烷) tetramethylsilane; TMS NMR测量中使用最多的化学位移基准物。结构式为 $(CH_3)_4Si$ 。常温下液态，无色透明，沸点26.3℃，易挥发，易燃，化学惰性。易溶于大多数有机溶剂，难溶于水，是非极性化合物。它的12个氢呈球形分布，是磁等价的，因此通常呈现单吸收峰。由于H与C都受到较大的屏蔽，在NMR图谱中一般化合物的NMR谱峰都出现在它的左边，化学位移δ呈正值。在测试试样时，它不与试样反应，不会干扰试样的谱峰。公认它的^{1}H谱化学位移$\delta(^1H)=0$，^{13}C谱中$\delta(^{13}C)=0$，^{29}Si谱中$\delta(^{29}Si)=0$。在试样中加入少量TMS作为内标。它沸点低，易挥发驱除它，便于回收试样。宜低温储存，且远离火花，冰箱照明灯继电器务必移出箱外，以免爆炸。

四氰基对醌二甲烷锂 lithium tetracyanoquinodimethane; Li-TCNQ 一种稳定的自由基，作为ESR测试时的标准样品，常用于确定样品的g值。Li-TCNQ粉末样品的g值为2.00252。



四圆测角仪 four circle goniometer 用于测定单晶样品及其衍射线在空间中指向的仪器设备。以X射线源的发射窗口中心、测角仪各轴的交点和检测器接收狭缝中心，三点构成测角仪的赤道平面。四圆测角仪的χ圆装在垂直于赤道平面的ω轴上，ϕ轴垂直于χ轴，并装在可以沿着χ圆转动的模块之上，ϕ、χ、ω三个轴在空间交于一点，当样品中心与交点重合时，测角仪为样品提供一个三维自由度，使样品的任意一条衍射线都能落在仪器的赤道平面上。检测器安装在与ω同轴、但可以独立转动的2θ轴上，从而可以检测和记录落在赤道平面上的衍射线的强度。记录每条衍射线的最强点处四个轴各自的角度值，也即是记录了衍射线的方向。

四圆衍射仪 four circle diffractometer 用于确定单晶样品的衍射方向和收集衍射强度数据，进而测定晶体结构的单晶衍射仪。由X射线光源、四圆测角仪、检测系统以及用于控制仪器和处理数据的计算机所组成，其核心部分为四圆测角仪，故而得名。以X射线源的发射窗口中心、测角仪各轴的交点和检测器接收狭缝中

心，三点构成衍射仪的赤道平面。四圆测角仪的χ圆装在垂直于赤道平面的ω轴上，ϕ轴垂直于χ轴，并装在可以沿着χ圆转动的模块之上，ϕ、χ、ω三个轴在空间交于一点，当样品中心与交点重合时，为样品提供一个三维自由度，使样品的任意一条衍射线都能落在仪器的赤道平面上。检测器安装在与ω同轴、但可以独立转动的2θ轴上，从而可以检测和记录落在赤道平面上的衍射线的强度。记录每条衍射线的最强点处四个轴各自的角度值，也即是记录了衍射线的方向。

饲料分析 feedstuff analysis 对饲料营养成分的测定，包括饲料混合均匀度测定，水分分析，粗脂肪分析，总糖、非还原糖和还原糖测定，淀粉含量测定，粗蛋白和可利用氨基酸测定，水溶性氯化物检验、无氮浸出物测定，磷、钙、锌和灰分含量测定等。饲料中必检项目包括水分、粗脂肪、粗纤维、粗蛋白、粗灰分、无氮浸出物及 Ca、P、Zn 等矿物质元素等的分析检验。此外，还包括饲料添加剂的分析测定。饲料有机营养成分可用近红外谱法测定、色谱法、紫外-可见光谱法等测定，无机成分可用原子吸收法、ICP-AES 等测定。饲料分析也可用化学分析方法。

饲料显微镜检法 microscopic examination of animal feeds 采用显微镜对饲料进行结构鉴别、混合比例、掺假情况鉴定等。鉴别饲料结构或特征的显微镜有两种，一种是复式显微镜（compound microscope），另一种是立体显微镜（stereomicroscope）。第一种用于鉴别饲料内部结构，第二种用于鉴别外部结构。显微图片不仅能提供饲料大致的外部特征（形状、颜色和组分的密度），还能反映饲料的掺假情况。此法在检验检疫部门，用于成分复杂的饲料样品的鉴别。

苏木素-伊红染色法 hematoxylin-eosin staining 病理组织切片常规染色法，也适用于脱落细胞学中肿瘤细胞的染色，对较厚的涂片、黏液较多的标本和细胞切片观察组织层，细胞核呈深紫色，胞浆染成红色。

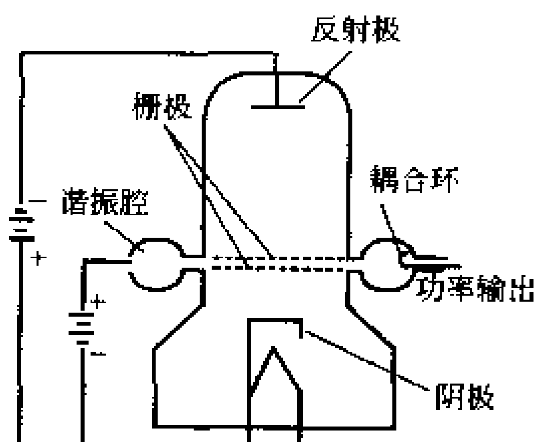
速差动力学分析 differential reaction-rate kinetic analysis 根据各待测组分反应速度差进行多组分同时测定的方法。速差动力学分析可采用形成、氧化-还原、催化（包括激活、抑制）、分解、缩合、金属置换、配位置换、协同萃取、光化学反应等，并结合胶束介质、调整酸度等化学措施来扩大待测组分间反应速度差，从而提高方法的选择性。一些用热力学方法难于实现的多组分测定，用动力学方法就容易得多。

速差动力学分析法 differential reaction-rate kinetic analysis 动力学分析法的一个重要分支。它基于各组分与同一试剂反应速率的差异，可不进行预先分离而实现相似组分同时测定的方法。这是由于反应的活化能和速率常数在很大程度上取决于反应所形成的活性中间体的结构，所以结构上

有微小差异的反应物将可能以明显不同的速度进行反应。速差动力学分析可采用形成、氧化-还原、催化（包括激活、抑制）、分解、缩合、金属置换、配位置换、协同萃取、光化学反应等，并结合胶束介质、调整酸度等化学措施来扩大待测组分间反应速度差，从而提高方法的选择性。此外，温度、溶剂等的变化对速率常数的影响亦较为敏感，通过这些条件的优化，可进一步扩大各组分反应速率的差异。

速度聚焦 velocity focusing 离子束从离子源加速引出时，m/z 值相同的离子束，初速度可能会有微小的差异，或者说具有不同的能量。通过某类装置，使具有不同的能量离子在空间特定的点聚焦，或者是在同一时间到达飞行时间质谱仪的漂移管空间的特定位置，此称为速度聚焦。

速调管 klystron 速调管就是一种产生微波的真空管。其基本构造原理如右图所示。电子从阴极发出后，经腔电压 V_0 加速，奔向与谐振腔相连的栅极，栅极上面的板极叫反射极，接负电压，电子穿过栅极继续向前时，遭到反射极的作用而减速（即速度被调制，故称为速调管），于是发生电磁波的辐射，进入谐振腔。谐振腔成环形（围绕整个管子），具有一定的共振频率，当电磁波辐射进入时，便激发起这种频率的振荡。谐振腔中有一类似于接受天线的耦合环，由于腔中电磁波的作用，而在同轴线中心导体上产生交变电流，输出腔外。速调管输出的微波频率可通过改变反射极电压或改变谐振腔体积的方法而调节。输出功率一般为几十毫瓦到几百毫瓦。一般在微波仪器中的微波源多是速调管，但现也有用固体微波源耿氏二极管代替。



塑料泵 plastic pump 又称全塑泵。是由高强度耐腐蚀的塑料制成的高压输液泵。在离子色谱中，经常使用强酸性或强碱性流动相，对金属泵有腐蚀作用，而且金属泵对痕量金属离子成分的分析有影响，所以在离子色谱中已逐步用全塑泵代替金属泵，连色谱柱管材料也开始使用塑料。

塑料压热器 plastic autoclave 适用于氢氟酸、王水及腐蚀性强的酸碱进行反应的密封厚壁聚四氟乙烯装置，外面套以不锈钢罐，可加热到200℃，耐压约0.5MPa。分解硅酸盐及一般矿物效果甚佳。特点是可防止挥发损失，无腐蚀玷污，分解充分，试剂用量少，空白低。

溯源性 traceability 又称可追溯性。通过连续的比较链，使一个测量结果或计量标准的量值能够以给定的

不确定度与国际或国家基准联系起来的特性。溯源是量值传递的逆过程，目的是保证量值的统一和准确。这种溯源可以是国际单位制的基本单位（例如安培）、无量纲的质量分数，定义的标度（例如 pH 或硬度）或在国家、国际标准中所描述的一种方法。如果是物理特性标准物质，通过经国家计量实验室校准的仪器，或通过溯源到国家计量实验室的仪器，通常可溯源到国际单位制（SI 单位制）。对于化学成分标准物质建立溯源性则比较困难，因为一种化学成分的测定需经过取样、溶解、分离富集和测定等一系列的操作过程，每一个操作过程都是溯源链中的一个环节，都带有自身的不确定度。只有正确地评定了每一个环节的不确定度，才能使所测定的化学成分量值溯源到相应的 SI 基本单位。任何标准物质的量值必须具有溯源性，各种分析结果的溯源，通过正确使用标准物质得以实现。

酸度调和剂 acidity regulators 亦称 pH 调节剂。是用以维持或改变食品酸度的物质。主要有用以控制食品的品质所需的酸化剂、碱剂以及具有缓冲作用的盐类。

酸碱滴定法 acid-base titration method 又称中和滴定（neutralization titration method）。利用已知浓度的碱或酸的标准溶液滴定试样溶液中酸或碱的容量分析法。当用标准碱溶液滴定酸时称酸量法（acidimetry）；当用标准酸溶液滴定碱时称碱量法（alkalimetry）。

酸碱电离理论 theory of acid-base electrolytic dissociation 亦称阿仑尼乌斯酸碱理论。基于 1887 年由瑞典化学家阿仑尼乌斯提出的电离理论认为，水溶液中凡能电离出氢离子（H^+）的物质称为酸，凡能电离出氢氧根离子（OH^-）的物质称为碱，酸碱反应的实质是 H^+ 与 OH^- 生成水 H_2O 的反应。这种理论有很大的局限性：由于它把物质的酸、碱性质的体现，孤立局限于物质本身，而未体现出外部因素对物质酸、碱性质的影响；把酸碱反应仅局限于水溶液，从而无法解释许多不能离解出 H^+（或 OH^-）的物质的酸（或）碱性质；大量有机碱（如胺类）的碱性；亦无法解释诸如气相中的，熔融碱和液氨中的酸碱反应。

酸水解法测定脂肪 determination of fat by acid hydrolysis method 测定粗脂肪含量的一种方法。将样品与盐酸溶液在 70 ~ 80℃ 水浴加热 40 ~ 50min 水解后，用乙醚或石油醚萃取脂肪，干燥后得脂肪含量。此方法适用于固体、液体样品，可测得游离态与结合态的脂肪，但测定磷脂时，因其分解使测定值偏低，此方法也不适用于糖含量高的样品。

酸洗法 acid wash 对载体进行钝化处理的一种方法，主要用来除去载体表面的铁等金属氧化物杂质。酸洗载体常用于分析酸类和酯类化合物。具体做法是将载体用 6mol · L^{-1} 的盐酸在加热的条件下浸泡 20 ~ 30min，

然后用自来水冲洗至中性，放入烘箱中烘干后即可使用。

酸效应 acid effect 络合滴定法中，将由于 H^+ 存在而使配位体 L 因形成 $H_iL(i=1,2,\cdots,n)$ 导致 L 平衡浓度降低，使其参加主反应能力降低的现象，称为酸效应。酸效应的概念亦用于处理其他平衡问题，例如，在沉淀平衡体系中，由于 H^+ 与沉淀物阴离子形成对应的弱酸而使沉淀溶解度增大的现象，亦称为酸效应。

酸效应系数 coefficient of acid effect H^+ 引起副反应时（参见**酸效应**条）的副反应系数称为酸效应系数，用 $\alpha_{L(H)}$ 表示，L 可以是配位体或其他弱酸根阴离子，$\alpha_{L(H)}$ 可用下式计算

$$\alpha_{L(H)} = 1+\beta_1^H[H^+]+\beta_2^H[H^+]^2+\cdots+\beta_n^H[H^+]^n$$

$$=1+\frac{[H^+]}{K_{a_n}}+\frac{[H^+]^2}{K_{a_n}K_{a_{n-1}}}+\cdots+\frac{[H^+]^n}{K_{a_n}K_{a_{n-i}}\cdots K_{a_1}}$$

式中，$\beta_i^H(i=1,2,\cdots,n)$ 为 L 形成 H_iL 酸的各级累积质子化常数；K_{a_i} 为 H_iL 的各级酸离解常数。

酸性磷酸酶染色法 acid phosphatase staining 网状细胞、巨噬细胞、浆细胞等胞浆中存在酸性磷酸酶，在酸性条件下能将甘油磷酸钠水解，释放出 PO 或萘酚 AS-BI，再与硝酸铅作用，生成磷酸铅沉淀，附着于酶活性存在之处，然后再与硫酸铵作用，生成不溶性有色物沉淀于酶活性处。可用于区别高雪细胞和尼曼-匹克细胞，前者强阳性，后者阴性；多毛细胞白血病呈强阳性反应，且不被酒石酸抑制，对此病的诊断有重要意义。

酸性磷酸酯萃取 acidic phosphate extraction 这类萃取剂是含有酸性基团的有机磷化物，主要是通过其结构中含有的一个（或两个）氢离子与水溶液中的金属阳离子相互交换而进行萃取的。酸性磷酸酯在水中溶解度较小，常以单体存在。但在非极性有机溶剂中，如苯中以二聚体形式存在。这类萃取剂在与金属离子形成络合物时，由于它们自身的缔合作用，络合物往往含有 8 原子的螯环。且因其在有机相中聚合，它们对金属离子的萃取机理比螯合萃取更为复杂。

酸性染料比色法 acid dye colorimetry 在适当的 pH 介质中，有机碱类（B）可与氢离子结合成鎓阳离子，而另一些酸性染料（常用者多为磺酸酞类的指示剂）在一定条件下可解离为阴离子，与上述鎓阳离子定量地结合成有色的络合物。此离子对可定量的被某种有机溶剂萃取，测定萃取液的吸光度或经碱化或酸化后释出的与有机碱结合的染料的吸光度，即可测定有机碱的含量。常用酸性染料有溴百里酚蓝、溴酚蓝、溴甲酚紫、溴甲酚绿、甲基橙、金莲橙 00、曙红、zincon、铬天青 S、四溴酚酞乙酯、苦味酸。

酸性洗涤纤维测定 determination of acid detergent fiber 样品经磨碎烘干，用溴化十六烷基三甲基铵的硫酸溶液煮沸并微沸回流 2h，过滤、热

水洗涤、丙酮洗涤，95～105℃烘干后即为酸性洗涤纤维的量，试样中的无机物含量可经灰化后扣除。中性洗涤纤维（NDF）的测定值与此法测定值之差为半纤维素的量。

酸雨分析 analysis of acid rain 参见湿沉降的测定条。

酸值和酸度 acid number and acidity 中和 1g 油品中的酸性物质所需要的氢氧化钾的量（mg）称为酸值，以 KOH 计，用 $mg \cdot g^{-1}$ 表示。中和 100ml 油品中的酸性物质所需的氢氧化钾的量（mg）称为酸度，以 KOH 计，用 $mg \cdot ml^{-1}$ 表示。酸值和酸度分别表示润滑油和汽油、煤油、柴油中所含有机酸的总量，是控制油品精制深度的项目之一。使用中的润滑油酸值增大到一定数值时就必须更换。

算法 algorithm 为解决某一特定问题而精确规定的一系列指令和运算步骤，并按照逻辑运行，获得特定的结果。

算术平均值 arithmetic mean 简称平均值。是全部测量值之和除以测量次数

$$\overline{X} = \sum_{i=1}^{n} \frac{X_i}{n}$$

式中，X_i 是单次测量值；$\overline{X}$ 是 n 次测量值的平均值。在等精度测量中，算术平均值是一组测量值中出现概率最大的值，表征了测量值的集中位置，当测量值数目足够多时，测量值对平均值的偏差之和趋于零，是总体平均值 μ 的无偏估计值。因此，常用它来表征测定结果。

随机变量 random variable 以概率取值的变量，其值依一定的概率随机出现，出现之前是无法确定的，出现在某一范围的概率是一定的，遵从统计规律。分为离散型随机变量和连续型随机变量。在分析测试中的测量值是一个以概率取值的随机变量，测量值在某一范围内变动，某一次测定之前，无法知道会出现什么测量值，但测定之后得到的测量值是确定的，多次重复测定所得到的测量值遵从统计规律性，通常遵从正态分布。随机变量与模糊变量的不确定性有本质上的区别，后者的结果亦是不完全确定的，具有模糊性。

随机抽样 random sampling 一种基本的抽样形式，样品总体中每个样品单位被抽中的概率相同。特点是既排除了抽样时人的主观随意性，也排除了人的主观能动性。当总体变异性大时，从总体中随机抽得的随机样本的代表性较差。

随机化 randomization 在一组测量值中，每个测量值都依一定概率独立出现，则称这组测量值的出现是随机化的。

随机刘维方程 stochastic Liouville's equation 也叫刘维方程。是统计物理学中的重要方程。刘维方程写成算符形式为

$$i\frac{\partial \rho}{\partial t} = \hat{L}\rho$$

其中刘维算符 $\hat{L}$ 在量子力学中就是哈密顿算符 $\hat{H}$ 和密度矩阵 $\hat{\rho}$ 的对易子

$$\hat{L}\hat{\rho}=i\ [\hat{H},\ \hat{\rho}]$$

在磁共振理论中，从刘维方程出发，推测在脉冲序列作用下，磁化强度随时间的演化，从而可以理论上解释磁共振谱，得到有关重要信息。

随机脉冲激发 stochastic pulse for excitation 方波激发脉冲序列是相干的，收到的信息可简单叠加。若脉冲的相位、强度或间隔至少有一项是随机的话，这种脉冲序列称为随机脉冲序列，用它来激发自旋系统就是随机激发。接收到的信息应该用互相关函数进行处理，然后经傅里叶变换后便得 NMR 谱。理论证明在脉冲功率相同的情况下，随机脉冲激发与方波脉冲激发有相同的信噪比。在平均功率相同的情况下，随机激发对脉冲强度的要求大为降低，脉冲宽度可更窄，使激发频谱更均匀。

随机区组试验设计 randomized block design of experiment 一种试验设计方法，按照局部控制的原则，将整个试验划分为若干组（区组），在同一区组内随机安排各因素的试验顺序。它的优点是，在同一区组内条件比较相近，试验精度较高，易于排除某些因素的干扰，有利于判断因素效应；随机安排试验顺序能使某些系统误差转化为随机误差，利用随机误差相互抵偿的特性，减小试验误差。

随机误差 random error 由于测试过程中诸多因素随机作用而形成的具有抵偿性的误差。遵循统计规律，在多次重复测量中，绝对值相同的正、负误差出现的概率大致相同，大误差出现的概率比小误差出现的概率小。由于随机误差中正、负误差相互抵偿的特性，多次测量平均值的随机误差要比单次测量值的随机误差小，当测量次数足够多时，测量的随机误差的平均值趋向于零，不影响测量的准确度。它使测量值产生波动，影响测量结果的精密度。随机误差是不可避免的，可以设法将其减小，但不能完全消除。在过去的化学文献中，将随机误差称为偶然误差，这种称谓往往会使人产生误解，以为随机误差是偶然产生的，实际上随机误差是不可避免的。有鉴于此，建议不要使用偶然误差这一术语。

随机相角法 random phase method 晶体结构测定中破解相角问题的一种直接法。符号附加法和多重解法等有一个共同的缺点，如果在相角推导的初始阶段就引入了错误的相角，则必然导致方法最终的失败。解决的办法是尽量扩大起始套中衍射的数目，以减小单个错误对最终结果的影响（这样做的代价是大大增加计算时间），我国科学家姚家星提出的随机相角法（RANTAN）将这一思路发挥到了极致。除了定义原点和绝对构型的衍射以外，此法为所有强衍射随机指定一个相角值，然后用正切公式小心地修正出一套最自洽的解。就单套解而言，此法不能保证其正确性，但在反复运行之后所得的几十套解中，一般总能得到足够好的解。RANTAN 在目前流行的大部分晶体结构解析程序中几乎都被设置为建立初始晶体模

型的默认方法。

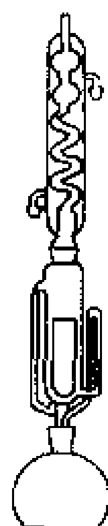
随机因素 random factor 其水平可由许多可能的水平中随机选取的因素。可由已试验过的因素水平效应，从统计上去推断该因素尚未试验过的其他水平的效应。如研究钢材在溶液中的腐蚀，从一批钢材中随机抽取一些钢材来进行试验，所得到的结论适用于整个这一批钢材，尽管有些钢材并没有进行试验，因为在这里钢材是随机因素。但是，钢材在试验所用的溶液有腐蚀或无腐蚀，不等于在其他的溶液中也有腐蚀或没有腐蚀，不能将在该溶液中的试验结论推广到其他溶液，因为在这里溶液是固定因素，其结论在统计上不能外延。

碎片离子 fragment ion 在质谱分析中，分子离子通过键断裂而产生的离子。每个离子在质谱上表示出一个峰，称为碎片峰（fragment peak）。

隧道效应 tunneling effect 当针尖与样品的距离为零点几个纳米时，针尖的电子波函数与样品表面的电子波函数交叠，在针尖与样品之间加上偏压，就会产生电流的流动，这种现象是量子力学现象，称为隧道效应或隧穿。

索勒狭缝 Soller slit 一种用于获得平行光束的光学准直器。一般由一组平行的金属片所组成，所得到的平行光束的发散度由金属片的间距和长度所决定，金属片的间距越小，长度越长，则所获得的平行光束的发散度就越小。

索氏抽提法 Soxhlet extract method 主要用于测定游离态脂肪酸含量。干燥样品用低沸点有机溶剂（如无水乙醚或石油醚）回流提取，蒸发除去溶剂即得到粗脂肪，索氏抽提法适用于脂类含量较高、结合态脂肪含量较少的样品。采用的仪器为索氏抽提器，如下图所示。



T

塔板理论方程 plate theory equation 也称色谱流出曲线方程。它是色谱学中的一个基本关系式。它描述加在第0号塔板上的样品分子，通过V体积的流动相后，于第n号塔板上出现该样品分子的概率。根据平衡色谱理论在线性分配等温线的理想条件下，流出曲线（即色谱峰的形状）应为对称的高斯峰形，与此曲线对应的方程称为流出曲线方程，如下式

$$c=\frac{W\sqrt{n}}{V_R\sqrt{2n}}e^{-\frac{n}{2}\left(1-\frac{V}{V_R}\right)^2}$$

或 $c=\frac{W}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(t-t_R)^2}{2\sigma^2}\right]$

式中，c为不同时间的组分浓度；W为进样量；V_R为保留体积；n为理论塔板数；V为流动相体积；t_R为保留时间；t为流出时间；σ为标准偏差。参见**标准偏差**条。

塔菲尔方程 Tafel equation Tafel在研究氢超电势时，发现在一定范围内，超电势与电流密度有如下定量关系：$\eta=a+b\lg|i|$，此式称为塔菲尔方程。式中，η为超电势；i为电流密度；a、b决定于电极材料、电极表面状态、温度及溶液组成等。塔菲尔方程不适用于电流密度i非常小的情况。

塔菲尔斜率 Tafel slope 在以电位对电流密度的对数值作图时所得到的半对数曲线上的直线段的斜率，通常以伏/电流幂次表示。

苔藓植物指示污染 bryophyte indicator for pollution 仅次于地衣的指示植物，如大气中二氧化硫浓度超过0.07×10^{-6}L/L，大多数苔藓植物就不能生存。1968年，在荷兰瓦赫宁根举行的大气污染对动植物影响讨论会上，附生隐花植物（主要指地衣和苔藓）被推荐为大气污染的指示生物。用生态学方法调查污染区树干上距地面1～2.5m高度范围内的树生地衣或附生苔藓植物的种类、数量和分布，在污染源附近会发现"地衣沙漠区"（没有地衣生长的地带），苔藓植物也是愈接近污染源种类愈少，甚至完全消失。根据地衣、苔藓植物的多度、盖度、频度以及种类数量的变化，绘制污染分级图，能清楚地显示出大气污染的程度和范围，还可以在移动程度上反映污染历史。

可以把非污染区的附生地衣或苔藓植物连同基质一同取下，制成直径5cm的圆盘，移到地衣和苔藓植物已经消失的污染区监测点上，挂在8～10m处的树干或架子上，圆盘面向污染源，定期观察受害情况和受害面积，然后进行化学分析，可以监测大气污染。或者制成苔藓植物监测器，进行定位定时监测。

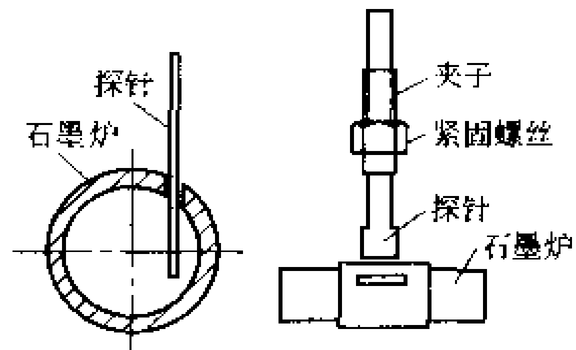
弹性光散射 elastic light scattering 又称为瑞利散射。光照射到样品上时光子与分子之间的碰撞作用只是改变了光子的运动方向，而并没有发生相互之间的能量交换的散射。

弹性碰撞 elastic collision 用量子理论解释光散射现象时，如果光子与分子之间的碰撞，仅仅是改变了光子的运动方向，并不发生相互间的能量交换，这种相互碰撞就称为弹性碰撞。

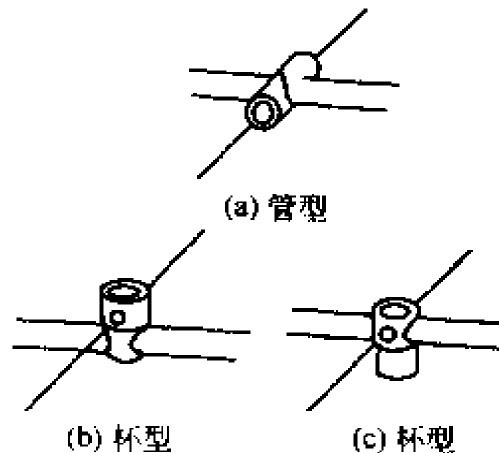
钽丝原子化器 tantalum filament atomizer 用细钽片做成的一种金属原子化器。试液注入原子化器内，用低压大电流电源供电加热升温，使试样原子化。它置于两端有石英窗的密闭套内，通氩气保护。它升温速度快，热均匀性好，最高温度可达2400℃，没有石墨炉高。没有试液渗透损失，使用一段时间后，易变形变脆。

炭化值 char value 煤油燃烧试验后灯芯结焦之量，以 mg·kg^{-1}表示。是灯芯供油燃烧器（加热或照明）用的煤油燃烧试验的评定指标之一。

探针原子化 probe atomization 石墨炉原子吸收光谱分析中一种实现等温原子化的方法。将样品置于片状或者丝状石墨或金属探针上，烘干。将石墨管（炉）加热到所需要的设定的温度后，再将盛有试样的探针迅速由石墨炉的进样口插入炉内，使试样蒸发、解离和被测元素原子化。这种原子化法的优点是可以分别控制试样灰化与原子化过程。由于是在等温的条件下实现原子化，可以减少以至可以避免已分解的分子再重新复合和凝聚而产生的分子吸收与光散射的影响，有利于消除基体干扰。如右栏上图。



碳棒原子化器 carbon rod atomizer; CRA 一种通过碳棒加热的商品电热原子化器。如右图。有管型和杯型两种。下图是改进型的碳棒原子化器，（a）是标准的9mm长的石墨管，（b）和（c）是标准的石墨杯，其中（b）是电流通过底部的电极加热杯，（c）是电流通过上部的电极加热杯。试样直接注入或放入石墨管或杯中。（c）的有效气温比（b）高500K，采用最大功率升温时高1000K。样品从温度较低的杯底蒸发进入温度相对较高的气相原子化，减小了气相中试样解离不完全和再结合，有效地抑制了基体干扰。它结构简单，热容量小，升温速度快。


(a) 管型
(b) 杯型 (c) 杯型

^{14}碳测定年代 radiocarbon dating 一种利用放射性同位素^{14}C 测定生物

遗骸和地质样品绝对年龄的方法。由利比（W. F. Libby）于1947年创立。宇宙射线中的中子与大气中的^{14}N反应产生放射性^{14}C，其半衰期为5692年。当^{14}C的产生和衰变之间达到平衡，以及大气、海洋等巨大的碳交换贮存库的调剂作用，使得大气中的CO_2中的^{14}C的放射性比活度A_0基本保持不变，天然碳中^{14}C的$A_0 = 2.75 \times 10^2 Bq \cdot kg^{-1}$。生物体和大气进行交换，其体内的放射性比活度十分接近A_0。生物死亡之后，同大气停止交换，体内的^{14}C放射性比活度按指数定律衰变，$A = A_0 \exp\left(\frac{-0.693t}{T_{\frac{1}{2}}}\right)$，$T_{\frac{1}{2}}$是$^{14}C$的半衰期。只要测定了放射性比活度$A$，就可以确定生物体从死亡至今的绝对年代$t$。该法最大可测年代约为四五万年，测定的精确度约为100年。广泛地应用于考古学、人类学、第四纪地质学领域。

碳电极 carbon electrode 以碳素材料为导电基体的电极，统称为碳电极。石墨电极、玻碳电极和碳糊电极等都是碳电极。

碳多孔微球 carbon porous microsphere 1968年Kaiser制备了一种碳吸附剂叫“碳分子筛”，它是由偏聚氯乙烯小球进行热裂解所得到的固体多孔状碳，其比表面积约$1000m^2 \cdot g^{-1}$，平均孔径为1.2nm。商品名叫“碳多孔微球”，其特点是疏水性强，用于色谱分离时可使水峰在甲烷前或后流出；柱效高；耐腐蚀和辐射；寿命长。主要用于一些永久气体的分析、金属热处理气氛及低碳烃中的水分分析等。

碳分子筛 carbon molecular sieve 商品名叫做碳多孔小球（TDX），是一种色谱固定相。常用于气相色谱中分离O_2、N_2、H_2、CO、CO_2、CH_4等惰性气体、低级烃类和低级含氧化合物，其主要成分为碳，由于它具有非极性的表面，因此对微量水的分析亦能得出较好结果。碳分子筛由偏聚氯乙烯小球进行热裂解而得到，具有优良的微孔结构，平均孔径为1.2nm，比表面为$1000m^2 \cdot g^{-1}$，微孔体积约为$0.45ml \cdot g^{-1}$。

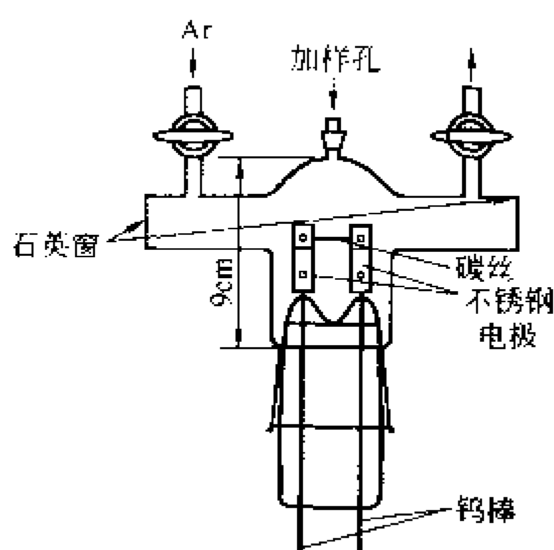
碳糊固定法 carbon paste immobilization 将酶用石蜡油等溶剂调匀，再加入石墨粉调制成糊状物，填充于玻璃管内制备成碳糊电极的方法。

碳内标 internal carbon referencing 将实验测得的样品中某一特定碳基团的C 1s峰结合能，与该基团的标准结合能谱相比较来确定样品荷电电位的方法。检测时一般选用样品中的碳氢基团，主要来自于真空中的油污染碳作为校准的基础。

碳水化合物测定 determination of carbohydrates 碳水化合物以多种形态存在，包括：（1）含量比较少的单糖（如葡萄糖、果糖、半乳糖、核糖等）；（2）含量较多的双糖（主要有蔗糖和乳糖以及少量的麦芽糖）；（3）少量存在且由多糖部分破坏而形成的糊精；（4）大量存在的多糖（如淀粉、纤维素、半纤维素、

果胶等)。单糖和双糖也称可溶性糖，其总量称总糖，其中葡萄糖、果糖、麦芽糖、乳糖等分子中带有自由羰基或存在半缩醛羟基，称为还原糖；蔗糖分子不具有还原性，称为非还原糖。消化后可取得能量的糖类，如可溶性糖、糊精、糖原、淀粉等，称营养性糖类，即有效碳水化合物。非营养性糖类是无效碳水化合物，也称膳食纤维素(或称食物纤维)，是指纤维素、半纤维素、戊聚糖、木质素、果胶、树胶等不能被人体消化酶所消化的多糖和木质素的总和。果胶可利用其在乙酸条件下与钙离子生成钙络合物沉淀来测定。测定单糖和低聚糖常用的方法有：物理法，包括相对密度法、折光法和旋光法；化学法，包括还原糖法(直接滴定法、铁氰化钾法、高锰酸钾法等)、缩合反应法等；仪器法，包括色谱法(薄层色谱、气相色谱、液相色谱、离子色谱)、近红外光谱法等；酶法等。还原性单糖可直接测定，双糖和多糖可以水解后测定，目前，液相色谱法已经成为测定各种糖的种类和含量的一种常规分离分析方法。

碳丝原子化器 carbon filament atomizer 也称石墨丝原子化器。一种将试样沉积在石墨丝上，加热蒸发和原子化的电热原子化器。如右图。石墨丝夹制在不锈钢电极之间，以 5V、100A 的电源供电，在 5s 内升温到约 2500℃，使试样蒸发和原子化。它放置在带有石英窗口的硬质玻璃容器内，通氩气保护。测定小量生物样品时能获得高的灵敏度。



碳纤维微盘电极 carbon fiber micro-disk electrode 将碳纤维封入绝缘毛细管中，然后抛光露出盘形端面，这样制成的电极。

羰基振动频率 carbonyl group frequencies 在有机化学、天然化学和药物化学中含羰基官能团 (C＝O) 的化合物是比较多见的，如酸酐、酰氯、酯、酮、醛、羧酸和酰胺等。由于种类较多，其各自的羰基伸缩振动峰 ($\nu_{C=O}$) 位置互不相同。一般含羰基化合物的羰基伸缩振动峰 ($\nu_{C=O}$) 如：脂肪酸酐在 1820cm^{-1}和 1750cm^{-1} 附近，芳香酸酐在 1850cm^{-1}和 1780cm^{-1}附近，酰氯在 1780cm^{-1}附近，酰亚胺在 1780cm^{-1} 和 1718cm^{-1} 附近，烷基醛在 1730cm^{-1} 附近，二烷基酮在 1715cm^{-1} 附近，芳基羧酸在 1690cm^{-1}附近等。鉴别脂肪族的酯、醛和酮是比较困难的。羧酸的羰基能和羧基生成很强的氢键，使得大多数

羧酸的羰基伸缩振动在 1700cm^{-1}附近，而羟基伸缩振动在 3500 ~ 2500cm^{-1}形成一条较宽的特征谱带。

唐南膜理论 Donnan's membrane theory 由唐南在 20 世纪初研究胶体膜两侧离子平衡问题时提出。其核心是唐南膜平衡。电解质溶液中，在不能透过胶体离子的半透膜两侧会产生平衡。例如半透膜的一侧是带固定负电荷、并以 Na^+ 为对阳离子的高分子电解质的水溶液（液相Ⅰ），另一侧是 NaCl 水溶液（液相Ⅱ）。膜只允许 Cl^- 自由通过、不允许高分子电解质阴离子通过。则有平衡关系式：$\frac{a^{Ⅰ}_{Na^+}a^{Ⅰ}_{Cl^-}}{(a^{Ⅰ}_{W})^r}=\frac{a^{Ⅱ}_{Na^+}a^{Ⅱ}_{Cl^-}}{(a^{Ⅱ}_{W})^r}$，此式称为膜平衡关系式。$a$ 是离子或水的活度；$r=\frac{V_{NaCl}}{V_W}$（NaCl 与水的摩尔体积比）；上标Ⅰ、Ⅱ是两液相的符号。由于要保持电中性，液相Ⅰ中与胶体离子同电荷的 Cl^- 的浓度要低，而且由于膜不允许胶体离子通过，在膜两侧会产生电位差，称为膜电压。膜平衡关系式是解释离子交换树脂内外离子分布、离子交换膜膜电位的基本关系式。

唐南排斥 Donnan exclusion 由于溶液中存在唐南膜平衡，电解质向离子交换树脂渗透时被排斥的现象。因为强酸性阳离子交换树脂的唐南排斥作用相当显著，所以在离子排斥色谱中通常采用强酸性阳离子交换树脂作固定相。

糖度线 sugar concentration graduation 纺织生产中对需要浆纱用的浆液测定总固体率。浆纱用的黏着剂（例如，淀粉、羧甲基纤维素、聚乙烯醇、聚丙烯酸酯等）水溶液的折射率与同浓度葡萄糖液的折射率非常接近。在折射仪上，除折射率标度外，还另设有专门测量葡萄糖水溶液质量百分浓度的标度线即糖度线，糖度线上某一确定值对应有一折射率值。故浆纱工艺中常用折射仪来测定浆液的总固体率。这种借糖度线标尺的读数表示的浆液总固体率，称为“浆液糖度值”。

糖精钠的测定 determination of sodium glucide 糖精学名为邻磺酰苯甲酰亚胺，其钠盐糖精钠可溶于水，FAO/WTO 规定的每日允许摄入量(ADI) ≤2.5mg · kg^{-1}。糖精钠的测定方法很多，标准方法有紫外分光光度法、酚磺酞比色法、薄层色谱法、纳氏比色法、离子选择电极法、高效液相色谱法等。

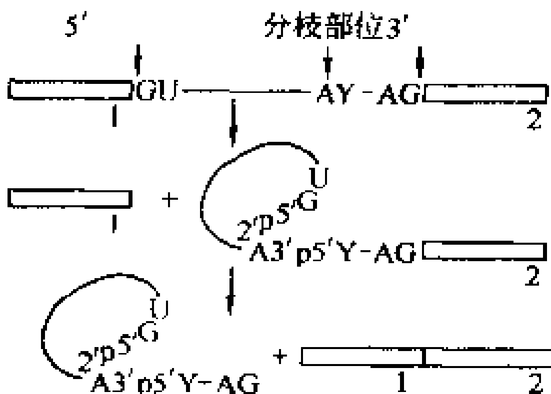
糖原染色法 glycogen staining method 又称 PAS 染色法。是糖原中的 1,2-乙二醇基被过碘酸氧化成醛基，与 Schiff 试剂中的无色亚硫酸品红反应生成红色化合物，沉着于胞浆糖原处。红白血病的幼红细胞呈强阳性，巨幼红细胞贫血的幼红细胞为阴性；急性淋巴细胞白血病原始细胞常呈粗颗粒或块状阳性，急非淋白血病原始细胞呈阴性、弱的弥漫性着色或细颗粒，有助于鉴别诊断。

陶瓷铅镉溶出量 lead and cadmium release from ceramics 在 22.2℃

用体积比为4%醋酸溶液浸泡陶瓷制品内表面24h，测定萃取液中铅、镉的含量。测定方法一般采用原子吸收分光光度法。浸泡过程中每件器皿必须用不透光玻璃板覆盖，以免溶液蒸发。

淘析 elutriation 应用平行流实现粒度分离的最简单的方法。两个不同尺寸的粒子在一个垂直的管里落入向上的气流中，大粒子因重力使其下落，若下落速度超过了气流升力速度，于是这个粒子的纯运动是下落；但对于小的粒子，下落速度比上升速度小，于是粒子被携带着向上运动，从而与大粒子分开。为了提高效率，设计了许多种淘析体系，如之字分类器就是其中的一种。用这种方法原则上可以得到粒度的分布。

套索型分子 lariat molecule 又称为套索型RNA，套索型结构等。指作为真核细胞mRNA前驱体接合反应的中间体，在基因内区形成的特异环状分枝结构以及具有该结构的RNA。如下图所示，基因内区的5′末端与3′接合部位附近基因内区中的分枝部位（一般为腺苷残基）通过2′-5′磷酸二酯结合形成环状结构，由



于具有套索绳的结构形状而得名。不仅在细胞核内mRNA前驱体的接合反应中，而且在霉菌、酵母的线粒体以及植物叶绿体的RNA前驱体等Ⅱ组基因内区、RNA都能自发接合形成套索型分子。在分子识别研究中沿用此名，有套索型冠醚等。

特殊选择固定液 selective stationary phase 某些固定液具有特殊选择性，这往往是组分与固定液分子间形成配合物或中间体的结果。常用的特殊选择固定液有：硝酸银保留烯烃、金属皂保留胺类、皂土-34分离芳烃异构体、液晶。

特效反应 specific reaction 亦称特异性反应。利用某种试剂就能与试样中的一种组分发生有特征现象的反应，从而可从试样中直接检出或测定这种组分而其他共存组分没有干扰，这种反应称为特效反应，所用试剂称为特效试剂。例如，利用NaOH与NH_4^+反应逸出有特征气味的NH_3气可直接从溶液中检出NH_4^+（严格地讲，由于CN^-在加热时亦能与NaOH反应逸出NH_3，事前还需加入氯化高汞除去CN^-干扰）；利用$K_4Fe(CN)_6$（亚铁氰化钾）与Fe^{3+}反应生成特征深蓝色的$Fe_4[Fe(CN)_6]_3$（普鲁士蓝）沉淀可直接从溶液中检出Fe^{3+}，都可称为特效反应。目前已知的特效反应为数不多。

特效试剂 specific reagent 一种试剂仅能与试样中一种组分发生有特征现象的反应，而其他共存组分没有

干扰，从而可从试样中直接检出或测定这种组分，这种试剂称为特效试剂。例如，用 NaOH 作试剂可直接从溶液中检出 NH_4^+；用 $K_4Fe(CN)_6$（亚铁氰化钾）作试剂可直接从溶液中检出 Fe^{3+}，则称 NaOH 为检出 NH_4^+ 的特效试剂，$K_4Fe(CN)_6$ 为检出 Fe^{3+} 的特效试剂。这两个反应都称为特效反应。

特性黏度 intrinsic viscosity 表示高分子溶液黏度的最常用的参数，定义为当高分子溶液浓度趋于零时的比浓黏度，表示单个分子对溶液黏度的贡献，是反映高分子特性的黏度，其值不随浓度而变，以 [η] 表示，常用单位是分升/克（dl/g）。由于特性黏度与高分子的分子量存在着定量的关系，所以常用 [η] 的数值来求取分子量，或作为分子量的量度。其值常用毛细管黏度计测得。

特征能量损失谱 characteristic energy loss spectroscopy 部分光电子在离开样品受激区域并逃离固体表面的过程中，不可避免的要经历各种非弹性散射，因而损失能量，在谱图中主峰低动能一侧将出现不连续的伴峰，叫特征能量损失谱。能量损失谱和物体表面特性密切相关。在电子束激发的电子能谱中，由于电子束可以激发原子的内层轨道，使电子束的能量产生特征损失，所形成的谱也就是特征损失谱。其特征损失能量与入射电子的能量无关，仅与激发的原子轨道有关，因此可以用来研究表面元素的信息。

特征浓度 characteristic concentration 能产生 1% 吸收或 0.0044 吸光度所需要的分析元素的浓度。它表征校正曲线在低浓度区的斜率。因它与测量噪声没有联系，因此不适于用来表征一个分析方法对被测元素的最低检出能力。

特征谱线 characteristic line 由于各元素原子结构不同，在光源的激发作用下，所产生的反映其原子结构特征的按一定波长次序排列的谱线。

特征 X 射线 characteristic X-rays 又称标识 X 射线。能量或波长由跃迁能级确定的 X 射线称为特征 X 射线。各元素的原子受电子束或高能 X 射线的激发，使处于较低能级的内壳层电子电离，整个原子呈不稳定的激发态，较高能级的电子便自发跃迁到内壳层空位，同时释放出多余的能量，使原子回到基态，这部分能量以 X 射线光子形式释放出来。对任一原子而言，各个能级之间能量差都是确定的。因此，各种原子受激发而产生的 X 射线的能量或波长也都是特征的，由原子结构决定。

特征 X 射线光谱 characteristic X-ray spectrum X 射线光谱中，由阳极靶材决定的、具有特定波长的不连续光谱线，又称标识 X 射线光谱。当入射电子的能量足以将原子内层的电子击出并跃迁到较高的未占能级时，高能级的电子将填入被击出电子的能级空位，并辐射多余的能量，即特征 X 射线。特征 X 射线的波长取决于受激发原子的核外电子分布，以及电

子跃迁时始态和终态能级之间的能量差。如果被击出的电子是K层电子，即得到K系特征X射线，相应地，被击出的电子是L、M层电子时，即得到L、M系特征X射线。

特征线组 characteristic line group 每种元素最易辨认的多重线组，称为该元素的特征线组。它一般不包含最后线。

梯度滴定 gradient titration 又称FIA滴定。是梯度技术的一种。以酸碱滴定为例：将一个含酸的样品带注入到一种碱的载液中，分散带逐渐被首尾两边界渗入的碱所中和。因此，在每一边界上都具有连续的酸碱浓度比，其中有一流体元中酸恰好为碱所中和。这两个等当点成对，具有相同的分散系数 D 值，在记录图纸上两点间的距离，在载流流速恒定时就是测得的 Δt，Δt 正比样品浓度的对数。梯度滴定是基于峰宽测量的FIA方法，也适用于络合滴定和氧化还原滴定。

梯度校正 gradient calibration 是FIA梯度稀释方法的另一应用。它同样基于化学反应在产生反应产物的同时物理分散有高度的重现性。可避免以系列稀释和系列注入标准进行重复校正，因为所需信息均已包含在最浓的标准样品的某些流体区段中。其方法为：从测得的峰上选择适当的延时，对应于特定浓度的流体区段，该浓度与系列稀释分别注入法所得的最大峰高，具有相同的信号值，一次注入即可得到多点的校正曲线。

梯度扫描 gradient scanning 是梯度稀释的延伸，即采用动态检测方式，在一定的范围内重复扫描某一物理参数。如多次扫描吸光度随波长的变化率或固定波长时吸光度随时间的变化率。这样就能提供三维谱图，显示生色或褪色的过程。快速扫描仪的扫描周期极短，如与FIA梯度技术相结合，在多组分分析中，梯度扫描的优点更为显著。扫描范围涉及电流/电位扫描和光谱法。

梯度稀释 gradient dilution 是FIA梯度技术应用之一，是从分散的样品带上选择适当的微元来获得分析读数，以扩大测定的浓度范围。流动注射分析不仅可以测峰值，必要时可在峰的任何部位采集信号。只要有准确重现的采集时间，这样就可方便地解决峰值超出测量范围或峰最大值有畸变的问题。另外，也可通过第二支阀取分散了的样品带的某一部分再注入，以实现进一步稀释，这又称区域采样。

梯度洗脱 gradient elution 为了在合理的时间内有效地同时分离弱保留和强保留组分，在洗脱过程中逐渐增加流动相流速、流动相强度或改变柱温的方法。在气相色谱中主要采用的是改变温度的程序升温法，而在液相色谱中温度的影响较小，主要是采用梯度洗脱，即改变流动相强度的流动相梯度。

梯度洗脱装置 gradient elution device 是按设定的程序，在洗脱过程中改变几种溶剂的比例来自动调节

（增强）流动相强度的装置。其主要部件除高压泵外，还有混合器和梯度程序控制器。其目的是使保留值相差很大的多种成分在合理的时间内全部洗脱并达到相互分离。根据溶剂混合是在泵前还是在泵后完成，可分为低压梯度和高压梯度。还可按混合溶剂（溶液）的种类称几元梯度，如三种溶剂混合称三元梯度。

梯度液相色谱　gradient liquid chromatography　采用梯度洗脱方式的液相色谱。液相色谱中的梯度洗脱主要是流动相强度梯度，即在淋洗过程中，通过改变流动相的组成或浓度使流动相的强度随时间连续增强（线性梯度）或间断增强（非线性梯度或阶式梯度）。

梯度增强核欧沃豪斯效应谱　gradient enhanced NOE spectroscopy; GOESY　以二维核欧沃豪斯效应谱脉冲序列为基础插入一对选择性180°整形高斯脉冲作用于特定核，再与一组梯度场脉冲相结合，可以以一维谱的形式获得与该核有极微弱的核欧沃豪斯效应（NOE）的核的共振信息，而其余磁化矢量信息能很好地抑制掉。因此它相当于灵敏度很高的NOE差谱。

体层摄影　tomography　也称断层或分层摄影。是利用体层摄影机把体内某一层的结构或病变的影像清晰地显示在X光片上，而其他层面的影像则模糊不清，从而达到诊断的目的。常用于肺部、纵隔、头颅、腹部及骨骼等部位疾病的检查，对于肿瘤的诊断及鉴别可提供特别有价值的信息。

体积排斥理论　size exclusion theory　又称平衡排斥理论。参见**平衡排斥理论**条。

体积排斥色谱　size exclusion chromatography; SEC　又称凝胶色谱。参见**凝胶色谱法**条。

体积色谱法　volumetric chromatography　是以测量组分体积为定量依据的色谱方法。以二氧化碳为载气，样品经色谱柱分离之后，各组分随载气顺序进入盛有50%氢氧化钾溶液的带刻度集气量管，载气二氧化碳被碱液完全吸收，载气中各组分的气体体积可在量管刻度上读出，以此求出各组分的百分含量。体积色谱法不需要已知浓度的标样气体进行校正即可作定量分析，但是要求各组分必须得到完全分离，它仅适用于对那些不与碱液反应的气体组分的分析。

体外竞争性放射分析　in vitro competitive radioassay　在体外条件下用放射性同位素标记化合物作示踪剂，以竞争性特异结合反应为基础，对体内微量物质进行定量分析的一类方法。包括放射免疫分析、竞争性蛋白质结合分析、放射受体分析等。它的特点是高灵敏度、高特异性、用样量小，方法简便。在医学、药物和生物学中有着广泛的应用。

体心格子　body-centered lattice　在正交、四方和立方晶系中可能出现的复格子。其特点是平行六面体单位格子（晶胞）的体中心处存在着附

加点阵点。每个体心晶胞中含有两个点阵点。

替换方法 alternative method 又称推荐方法。其权威性次于标准方法。由于标准分析方法的建立需要较长的时间，加之审批的程序又比较复杂，因此使标准方法的更新受到一定的局限。随着科学技术的发展和研究工作的深入，新的分析方法必将不断问世。许多新的分析方法从总体水平看可能与标准分析方法是相近的，有一些可能比标准分析方法更为优越和先进，具有更广泛的实用价值。美国环保局将这类已具有充分实验基础和实验数据的新方法经过审批后作为“替换法”(alternative method) 或“等效法”(equivalent method)。这些替换方法必须经过必要验证程序。只有证明其原理新颖，性能与标准分析方法相当或优于标准分析方法时才能获得批准。

天平的感量 reciprocal sensibility 天平能准确称取的最小质量。例如，分析天平的感量为0.1mg，表示它能准确称量到0.0001g位，即所谓万分之一的天平。例如，在分析天平上称得0.5878g试样，则试样的真实质量为(0.5878 ± 0.0001)g。

天然丰度双量子转移实验 incredible natural abundance double quantum transfer experiment; INADEQUATE 利用有机分子中存在的^{13}C-^{13}C标量耦合^{n}J (^{13}C-^{13}C) 相关性而直接确定分子中碳原子间连接和分子构型的重要方法。它与^{1}H—^{1}H耦合信息可以互相补充。在天然丰度下实验测得的^{13}C谱实际上是在其邻接的核素为^{12}C环境下的信息，呈单峰，称为主峰。当邻接的碳核为^{13}C时出现耦合裂分的双峰，呈卫星峰，测量十分困难。本方法是通过特定脉冲序列使^{13}C—^{13}C核之间的耦合关系产生双量子跃迁，再利用这双量子跃迁与单量子跃迁相位有截然不同的特性，借助相循环而记录下来，有效地抑制掉非常强的不耦合的^{13}C主峰，专门检测这些强度极低的成对的卫星峰(或称伴线)。其脉冲序列为：对^{1}H作全去耦的同时，对^{13}C为$(90°_x-\tau-180°_y-\tau-90°_x)-\Delta-90°_\phi-$相循环采样。括号内脉冲序列是用于产生多量子相干的基本脉冲序列。再经过非常短的延迟（~10μs），可重置射频脉冲相位。最后一个90°脉冲就是将多量子相干转变为单量子相干。所检测的信号以反相（一正一负）成对地出现。这样在谱图中从相同$^{n}J_{CC}$的碳峰之间的关系，可以确定分子内碳骨架是如何连接的。

天然胶乳的鉴定方法 identification of natural latex 天然胶乳俗称橡浆，由橡胶烃（聚异戊二烯）、水和非橡胶成分（蛋白质、树脂、糖类、无机盐类等）组成。新鲜胶乳大体呈中性，pH值约为7，放置后，由于受细菌和氧的作用而酸性增大，当pH值接近5时，则发生自然凝固。因此，常加氨来调节其pH为9~10，在碱性下保持稳定。天然胶乳经离心分离浓缩，得到离心法浓缩天然胶乳，它分为高氨天然胶乳和低氨天然胶乳。前者只用氨保存，或先用甲醛

再用氨保存，碱度（氨含量按胶乳计）至少应为0.60%；后者用氨与其他保存剂合用来保存，碱度不超过0.29%。鉴定天然胶乳时，先鉴定其外观品质，天然胶乳为乳白色乳液，有浓烈氨味。其次，用乙酸溶液处理样品，经乙酸溶液处理后，迅速形成白色胶团，该胶团拉伸性能和弹性均较好。最后，用红外光谱等手段鉴定白色胶团主要成分是否为聚异戊二烯。天然胶乳中含有少量蛋白质，其红外谱图中聚异戊二烯的谱峰外，还在1638cm^{-1}（酰胺Ⅰ谱带）和1540cm^{-1}（酰胺Ⅱ谱带）处出现弱吸收。

天然橡胶鉴定方法 identification of natural rubber 天然橡胶的成分是橡胶烃、水分、树脂、蛋白质、糖类和无机盐类。鉴定天然橡胶时，先鉴定其外观品质及是否有天然橡胶特有的气味：不含杂质的天然橡胶透明而略带黄色，烟胶片还应有烟熏味，硫化橡胶还应有硫磺气味。天然橡胶的拉伸性能和弹性均较好，抗张强度一般比合成橡胶高。拉伸后对光观察，其透光性能应较好。其次用不同溶剂溶解样品，观察其溶解性能：天然橡胶溶于苯、溶剂汽油、二硫化碳、四氯化碳、氯仿、松节油等不溶于乙醇和丙酮，溶解时，先溶胀，然后逐渐形成黏性的胶体溶液。最后鉴定树脂主要成分是否为聚异戊二烯：天然橡胶中含有少量蛋白质，其红外谱图中除聚异戊二烯的谱峰外，还在1638cm^{-1}（酰胺Ⅰ谱带）和1540cm^{-1}（酰胺Ⅱ谱带）处出现弱吸收。

添零技术 Filled zero technique 一种提高分辨率的方法。在FT-NMR实验中，取样速率必须设置成观察谱宽的2倍，以避免折叠。取样时间要综合考虑谱图的灵敏度与分辨率。考虑到灵敏度的要求，许多情况下，FID信号的采样时间不能设置得太长，这往往造成NMR谱的分辨率变差。为此在傅里叶变换之前，在FID信号后面额外添许多零数据点可以改善谱的质量，这种方法称为添零技术。添加与采集FID信号一样多个零数据点可恢复一些失掉的信息，更多的添零不再会增加信息，但可改善谱线的形状，提高谱图精度。

甜味剂 sweeteners 赋予食品甜味的食品添加剂。目前世界上使用甜味剂近20种，按其来源分为天然甜味剂和人工合成甜味剂；以营养价值分为营养甜味剂和非营养甜味剂；按化学结构和性质分为糖类和非糖类甜味剂。

填充毛细管柱 packed capillary column 一种先将多孔性填料疏松地装入厚壁玻璃管中，然后将玻璃管拉制成所需粗细（内径为0.25～0.5mm）的毛细管柱。填料若选用热稳定性良好的载体，如硅藻土类载体，则可在其上涂渍固定液，成为气-液填充毛细管柱；若装入的填料为吸附剂，如碳分子筛、活性氧化铝等，则成为气-固填充毛细管柱。

填充柱 packed column 在不锈钢

柱管或石英毛细管中填充色谱填料的分离柱。液相色谱中使用的都是填充柱，柱管除不锈钢管外，也有塑料柱管（多为离子色谱柱）、气相色谱中的填充柱除填充毛细管柱外，也有内径2～6mm、长0.5～10m（一般为1～3m）的不锈钢柱或玻璃柱。由于填充柱可填充种类繁多的固定相，样品负荷量大，因此应用较为普遍。

填充柱反应器 packed column reactors 是FIA常用的富集和分离模件之一。通常是一个小型的填充了活性物质的柱子，其大小常为 ϕ1.5～3mm，长20～50mm，填充物有离子交换剂、沉淀剂、吸附剂、金属颗粒还原剂或固定化酶等。借此将注入的样品进行适当的在线处理，以利于分析物的检测。例如，将待测组分进行预浓集，或将分析物转化成可检测的形式等。惰性填充反应器可减少轴向分散，促进径向分散。

填料 packing material 用作色谱固定相的材料。通常制备成5～10μm粒径的球形颗粒，并对其表面进行修饰和改造，以适合不同物质成分的分离。

条件溶度积 condition solubility product 考虑沉淀反应有关组分（沉淀离子M、沉淀剂L）的副反应后的溶度积。对于沉淀平衡 $M_mL_n(S) \rightleftharpoons mM^{n+} + nL^{m-}$，由于

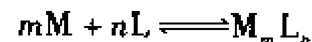
$[M'] = [M]\alpha_{M(A)}$；$[L'] = [L]\alpha_{L(H)}$

所以，条件溶度积

$$K'_{sp} = [M']^m[L']^n = K_{sp}\alpha_{M(A)}{}^m\alpha_{L(H)}{}^n$$

式中，$\alpha_{M(A)}$ 和 $\alpha_{L(H)}$ 分别是金属离子 M^{n+} 因配体A存在和沉淀剂离子 L^{m-} 因质子化引起的副反应的副反应系数。参见**溶度积**和**副反应系数**条。

条件形成常数 conditional formation constant 亦称条件稳定常数。配位反应中以配合物的稳定常数表征配位反应进行的程度。因副反应存在将影响所形成配合物的稳定性，当考虑配位反应有关组分的副反应后的稳定常数称为条件形成常数。对于配位反应



$$mM + nL \rightleftharpoons M_mL_n$$

条件形成常数：$K' = \dfrac{[(M_mL_n)']}{[M']^m[L']^n} = \dfrac{[M_mL_n]\alpha_{M_mL_n}}{[M]\alpha_M^m[L]\alpha_L^n} = \dfrac{K\alpha_{M_mL_n}}{\alpha_M^m\alpha_L^n}$。式中，$[M_mL_n]$、$[M]$ 和 $[L]$ 以及 $\alpha_{M_mL_n}$、α_M 和 α_L 分别为配合物、金属离子和配体的平衡浓度以及副反应系数。当系数 $m = n = 1$ 时，如EDTA与金属离子配位，则 $K' = K\alpha_{ML}/\alpha_M\alpha_L$。

调幅式差示扫描量热仪 modulated differential scanning calorimeter；MDSC 该仪器是在传统的DSC线性加热或线性冷却基础上叠加了一个正弦的温度加热速率，再利用傅里叶变换的叠加法，不断地对热流进行计算，从而得到比传统DSC更多的信息，如总热流、调幅热流、可逆热流、不可逆热流和热容。它可提供高灵敏度、高分辨率和高解析度的信息，例如：（1）可测量微小相转化；（2）分离相近或相重叠的变化；（3）分离与热容相关的可逆现象，可得到与动力

学相关的不可逆现象；（4）测量材料的真正的初始结晶度等。

调整保留时间　adjusted retention time　又称表观保留时间，某组分的调整保留时间是指该组分的保留时间扣除死时间（参见**死时间**条）后的差值时间，用 t_R' 表示，单位是 min。调整保留时间、保留时间、死时间三者的关系为 $t_R' = t_R - t_M$，式中，t_R、t_M 分别是组分的保留时间与死时间。参见**保留时间**条。

调整保留体积　adjusted retention volume　又称表观保留体积，某组分的调整保留体积是指该组分的保留体积扣除死体积（参见**死体积**条）后的差值体积，用 V_R' 表示，单位是 ml。调整保留体积、保留体积、死体积三者的关系为 $V_R' = V_R - V_M$，式中，V_R、V_M 分别表示组分的保留体积与死体积。

调整型抽样检验　adjustable sampling inspection　一种根据抽样检验结果及时调整抽样检验严格程度的抽样检验方法。在正常抽检过程中，如果连续 10 批产品抽检合格，且抽检的总产品数中的不合格产品数不超过放宽抽检所规定的限制数，可由正常抽检转为放宽抽检。如果在放宽抽检过程中，有一批产品不合格或不能肯定是否合格，则由放宽抽检转为正常抽检。在正常抽检过程中，连续检验 5 批产品，若有 2 批产品不合格，则采取更加严格的抽检方案对以后的产品进行检验。如果在加严抽检后，最初连续检验的 5 批产品都合格，则可由加严抽检转为正常抽检。

调制幅度　modulation amplitude　现在多数的 ESR 仪器都是采用高频小调场方式，调制幅度就是指高频调制磁场的峰-峰幅度。对于调制幅度大小的选择，要看实际需要。为提高谱线的分辨率和减少线型失真，应选择较小的调制幅度，一般选 ESR 谱线的峰-峰宽度的 $1/3 \sim 1/5$ 左右的数值为宜。如果主要以提高灵敏度为主，对线型的真实性要求不高，则可增大调制幅度以增加信噪比。

调制频率　modulation frequency　大多数 ESR 谱仪是采用磁场调制，即将积分信号转换成一次微分信号，以提高灵敏度和分辨率。一般在样品腔中安装调制线圈，用它产生的高频磁场对扫描磁场进行调制，常用的调制频率为 100kHz。如果调制频率接近于 ESR 线宽（用频率表示）大小时，观察到的谱线也将严重畸变。这是因为晶体检波器是一个非线性元件，它的输出含有微波频率和调制频率的和频与差频，其结果就会产生调制边带共振线。100kHz 调制频率产生的两条第一调制边带的间隔恰好为 3.6×10^{-3} mT，因此不宜用 100kHz 以上的调制频率来记录峰-峰宽度窄于 1.0×10^{-2} mT 谱线，否则可能会产生明显的调制增宽或虚假谱线。要研究峰-峰宽度很窄的谱线，应降低调制频率；或为了兼顾灵敏度和分辨率而采用超外差式谱仪。

铁磁共振　ferromagnetic resonance

即铁磁体的电子自旋共振。因所有的磁矩作为一整体一起做拉莫尔（Larmor）进动，在测量共振频率时需要进行反向磁场和磁各向异性的修正。可用于铁磁样品各种磁参数的测定，也可用于磁各向异性能量的测量。

铁磁性 ferromagnetism 磁性原子（或离子）或金属的自由电子，在正的交换作用下其磁矩平行排列产生自发磁化时形成的磁性。具有铁磁性的物质叫做铁磁体。铁磁体具有磁畴结构，在较弱磁场下磁化就达到饱和，因此其磁化率都很大。当温度高于居里温度时，磁矩平行排列的结构被热运动打乱，自发磁化消失，一般变为顺磁性。Fe、Co、Ni 等是铁磁性元素（它们的居里温度分别是 1043K、1388K、631K），含这些铁磁性元素的合金及 EuO、CrO_2 等都是铁磁体。

铁的价态分析 valence analysis of iron 关于铁的氧化态的分析方法和技术。铁在地壳中是含量丰富的元素，是人和生物的必需营养元素。铁的常见氧化态有 0，+2 和 +3 价。在还原性条件下，二价铁占优势；在氧化性条件下，三价铁占优势。生活饮用水中铁含量最高允许浓度为 $0.3mg \cdot L^{-1}$，地面水为 $0.5mg \cdot L^{-1}$。铁的价态分析通常是基于其氧化还原和络合能力的差异进行不同的化学处理来实现的。

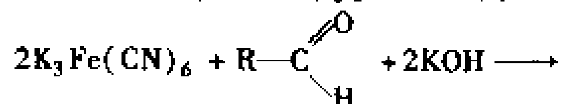
铁谱线组 ferrous line group 由几组谱线波长相近、相对强度已知且不随激发条件而改变的铁谱构成。常用的铁谱线组列于下表。

铁谱线组及其相对强度表

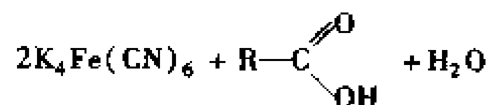
第一组		第二组		第三组		第四组			
波长/nm	lg*I*	波长/nm	lg*I*	波长/nm	lg*I*	波长/nm	lg*I*	波长/nm	lg*I*
316.387	28	295.02	50	315.32	10	324.419	66	317.801	13
316.886	49	287.23	10	315.78	17	323.944	61	317.545	22
316.501	62	286.93	13	315.70	30	322.579	00	316.066	20
316.586	83	284.04	08	316.06	36	322.207	90	315.789	01
316.644	00	283.81	30	320.53	60	321.738	34	315.704	13
317.545	30	282.88	76	320.04	68	321.594	48	315.321	94
318.023	56	280.45	59	322.20	05	320.540	44		
319.693	1.80			322.57	2.16	320.047	1.51		

前两组谱线适用于直流电弧，第三组谱线可适用直流电弧、交流电弧和高压电容火花光源。

铁氰化钾法测定还原糖 determination of reduced sugar with potassium ferricyanide 在碱性溶液中还原糖能将铁氰化钾[$K_3Fe(CN)_6$]还原为亚铁氰化钾[$K_4Fe(CN)_6$]，反应为



$$2K_3Fe(CN)_6 + R—C(=O)H + 2KOH \longrightarrow$$



$$2K_4Fe(CN)_6 + R—C(=O)OH + H_2O$$

多余的铁氰化钾在醋酸的存在下，氧化碘化钾析出碘，再用硫代硫酸钠标准溶

液滴定析出碘。为了使反应正向进行，用硫酸锌沉淀反应中所生成的亚铁氰化钾。由滴定游离碘所消耗的硫代硫酸钠量就知道还原糖含量的多少。但是，还原糖量与硫代硫酸钠用量之间并不成简单的线性关系，因此不能按照反应式直接计算还原糖含量，需用经验的查表法求得还原糖含量。

烃基振动频率 alkyl group frequencies 烃基（—CH_n）是含有碳和氢的化合物在红外光谱中的特征吸收峰。其特征峰包括饱和的和不饱和的C—H伸缩振动；C—H弯曲振动等。不饱和C—H伸缩振动（ν_{C-H}）的红外吸收大于$3000cm^{-1}$，饱和C—H伸缩振动（ν_{C-H}）的红外吸收小于$3000cm^{-1}$。饱和C—H伸缩振动（ν_{C-H}）在$3000cm^{-1}$以下有四个吸收峰。CH_3—在2960（ν_{as}）和$2870cm^{-1}$（ν_s）附近，CH_2—则在$2925cm^{-1}$（ν_{as}）和$2850cm^{-1}$（ν_s）附近。C—H弯曲振动（δ_{C-H}）在1500～1400 cm^{-1}，甲基在$1380cm^{-1}$和$1460cm^{-1}$附近，次甲基在$1470cm^{-1}$附近。

烃类气体监测方法 hydrocarbon vapor monitoring method 由于碳氢化合物种类繁多，对于环境大气监测而言，通常用总烃（C_2～C_8）这一概念来表示这类化合物的污染，并按其在环境中的反应活性，常用两种方法表示：一种是包括甲烷在内的碳氢化合物，称总烃（THC）；另一种是除甲烷以外的碳氢化合物，称非甲烷烃（NMHC）。总烃系用火焰离子化检测器（FID）法测得。甲烷则是用气相色谱-火焰离子化检测器测得，即将大气样通过色谱柱，只让甲烷通过，分子量较高的烃被滞留。从总烃中减去甲烷即得非甲烷烃。

而对于空气中NMHC的监测，目前主要采用差减法，并且烃的种类太多，难于得到合适的标准物质，所以数据均欠准确。

停流法 stopped flow method 类似混合流动法的一种测定短寿命自由基的方法，即通过适当的设备控制，使新混合的溶液流入样品池后，在样品池内停留足够时间，对其进行ESR观测，然后排除旧的反应液，再进行新一轮的混合、导入样品池、停止流动和ESR观测。这个过程可反复循环进行。这种方法主要应用于观察自由基的产生与消失，研究反应的动力学过程。

停流分光光度法 stop-flow spectrophotometry 利用流动注射分析中的停留技术，通过反应产物的吸光性质进行物质定量测定的一种分析法。流动注射停留技术可以在不增大分散度的条件下，增加试样与试剂反应的完全程度，从而提高测量灵敏度，还可以选择延迟时间和停泵时间来满足各种化学反应速率的要求。

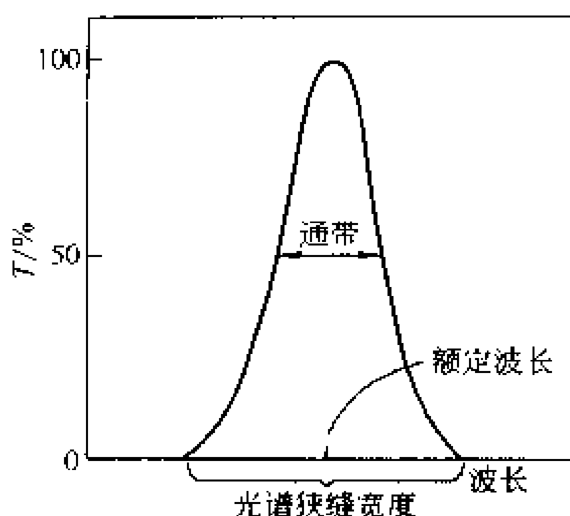
停流技术 stopped-flow technique 是FIA梯度技术的应用之一，样品带停流的位置可以部分的在流通池内，或在流通池前的其他地方。停流技术的主要目的是增加住留时间，即增加净反应时间，提高分析的灵敏度；其次是扣除来自基体背景信号的干扰。

由于是测定反应产物在停流周期内的净增长率，因而不受样品底色或浑浊的影响。另外也可用于测量一级和准一级反应的反应速率。

停流进样 stop-flow injection 使色谱泵在停止状态下直接通过隔膜进样，将样品注入色谱柱的一种进样操作方法。因为注射器隔膜进样法不能在高压下操作，所以预先将色谱泵停止工作，卸压后再进样，然后重新启动色谱泵进行分离和分析。停泵和重新启动泵往往会因隔膜的污染出现“鬼峰”，而且这种进样方式的保留时间的重复性不好。

停流荧光法 stop-flow fluorimetry 利用流动注射分析中的停流技术，通过反应产物的荧光性质进行定量测定的一种分析方法。流动注射停流技术可以在不增大分散度的条件下，增加试样与试剂反应的完全程度，从而提高测定灵敏度。还可以选择延迟时间和停泵时间来满足各种化学反应速率的要求。荧光检测与停流技术相结合进一步提高了测定的灵敏度。

通带 bandpass 亦称有效带宽。无论仪器中光学系统的质量多么高，经单色器单色化后的光总是有一定的波长（宽度）范围，即具有以所指定波长（额定波长）为中心分布的一定波长范围。常以谱带半宽度（half bandwidth），即最大透光度值的一半处的谱带宽度表征（参见右图）。



通光口径 clear aperture 在光学系统中，透镜、反射镜、棱镜等等光学元件都有一定尺寸，而且在安装入镜框、镜架上时还受到机械零件的限制。通光口径就是在仪器中各光学零件真正能不阻拦光束、让光束通过的口径；通光口径形状可以是圆形的（透镜的口径），也可以是方的、长方的（棱镜、光栅口径），甚至是异形的（光学系统存在光束遮拦情况时）。所以通光口径不等于光学零件的机械外形尺寸。

通用型检测器 common detector 是对所有溶质或含有溶质的柱流出物都有响应的检测器。所谓通用也只是相对的，不可能存在一种对任何物质都有响应，且具有一定响应强度的检测器。最常见的通用型检测器有示差折光检测器、热导检测器、介电常数检测器和火焰离子化检测器。通用型检测器容易受共存非被测组分的干扰。

同步辐射 synchrotron radiation 带电粒子被直线加速器加速后注入磁

场中，由于磁场作用，它将在一个称作存储环的环形轨道中运动，而带电粒子在加速运动的过程中向外辐射电磁波。可以利用这种电磁波作为激发光电子的光源，称为同步辐射。同步辐射的光子具有以下优点：所辐射的光是高度准直光；辐射光子能量很宽并可选调；具有很高的辐射强度；是高度偏振的。

同步辐射 X 射线荧光法 synchrotron radiation X-ray fluorescence spectrometry；SRXRF 利用同步辐射激发产生的 X 射线荧光进行定性和定量分析的方法。1974 年，在同步加速器上发现了同步辐射（SR），它是一种理想的多功能激发光源，特点是：（1）强度高，稳定性好，强度比通常的3kW 的 Rh 靶 X 光管发出的 X 射线强度高 3～4 个数量级；（2）光谱范围宽和连续可调，SR 辐射能从 0.00x 到 100keV 连续可调，用不同的单色器可以从连续光谱中准确地分出所需任一波长的单色光，有选择地激发被测元素；（3）光束发散角小、准直性好，SR 与全反射能量色散 X 射线荧光谱仪相结合，可以提高峰背比和选择性；（4）偏振性能好，在电子轨道平面上是 100% 线性偏振光，信背比比质子荧光大 5～50 倍，检出限可以达到 $\mu g \cdot ml^{-1}$ 和 pg 级；（5）短脉冲发射，脉冲长度约为 100ps，对样品的热和辐射损伤少，不会使生物样品失去活性，有利于分析挥发性和生物样品；（6）试样用样量很小，甚至可以同时测定一根头发中的微量元素及其分布；（7）不破坏样品。缺点是设备昂贵。参见 **X 射线荧光法**条。

同步辐射源 synchrotron radiation 利用同步加速器运行时发射的同步辐射的新型光源。同步辐射是电子在磁场力作用下改变方向及速度时辐射出的电磁波。以同步辐射作为光源的优点是强度高、稳定性、准直性和偏振性好，波长连续可调。同步辐射的波长范围可从红外区到硬 X 射线区，利用同步辐射作为光源，可以从事光电子能谱、光化学、软 X 射线显微、光刻、X 射线衍射、散射、吸收边精细结构、荧光分析、生物光谱等多方面的研究工作。与 60kW 转靶 X 射线源的特征谱和连续谱相比，同步辐射光源的亮度要高 3～6 个数量级。因此用同步辐射光源可以获得试样的动态、瞬变信息。

同步辐射源 X 射线形貌术 synchrotron radiation topography 以同步辐射为光源的 X 射线形貌术。按照光源的特点，可以分为以下两种：（1）与劳埃法相同，以连续的 X 射线照射样品，所得的劳埃照片上每一个衍射斑点都对应于一张高分辨的形貌图；（2）用单色器选择任意波长的辐射做入射辐射，由于不局限于某一元素的特征辐射，可避开一些元素的吸收限，有利于提高形貌图的分辨率。

同步荧光 synchronous fluorescence 同时扫描两个单色器波长，由测得的荧光强度信号与对应的激发波长

（或发射波长）构成光谱图，称为同步荧光光谱。根据激发和发射两个单色器在同时扫描过程中彼此间保持的关系，同步荧光测定有三种类型。第一种类型是在同时扫描过程中使激发波长（λ_{ex}）和发射波长（λ_{em}）彼此间保持固定的波长间隔（$\lambda_{em}-\lambda_{ex}=$常数），此称为"固定波长差同步扫描荧光测定"，即习惯上所说的同步荧光测定法。第二种类型是以能量关系代替波长关系，在两个单色器的同时扫描过程中使激发波长与发射波长之间保持固定的能量差，此称为"固定能量差同步扫描荧光测定"。第三种类型是在测绘同步光谱时，使激发和发射两个单色器以不同的速率同时进行扫描，称为"可变角（或可变波长）同步扫描荧光测定"。一般的荧光光谱仪可以很方便地进行固定波长差同步扫描荧光测定，而后两种同步荧光测定方法则需要相应的仪器软件。同步荧光法的优点是可以使光谱简化、谱带变窄、减小光谱的重叠以及减小散射光的影响等。

同工酶 isoenzyme 在同一种属或同一个体中催化相同的化学反应而酶的分子结构不同的一组酶，是由不同基因位点、或等位基因编码的多肽链组成的单位或寡聚体的同一类蛋白质，其蛋白的一级结构、理化性质和免疫学性质不同，但能催化相同化学反应的一组酶。

同核二维化学位移相关谱 homonuclear two dimensional chemical shift correlation spectrum 最常用的同核位移相关谱称为COSY，其基本脉冲序列图是：90° $-t_1-$ 90° – 采集FID（t_2）。同核二维相关谱图是正方形，二维坐标都同为某区域的化学位移，对角线上的峰称为对角线峰，直接反映各峰的化学位移，有时也称为自动相关峰（autocorrelated peaks）。从两个对角线峰出发作平行线和垂直线时，在其交叉点处呈现的谱峰称为交叉峰（cross peaks）或相关峰（correlated peaks），它们反映了具有这两个特定的化学位移的基团之间的耦合关系，主要是^3J耦合关系，有时也会出现少数反映长程耦合的相关峰，但一般强度比较弱。因此，可从同核二维相关谱中直接获取各基团谱峰的化学位移及它们之间的耦合关系，指认谱峰的归属并推断分子内部结构。它是二维谱的核心，使用最多。

同核二维化学位移相关谱-二维核欧沃豪斯效应谱的组合谱 combined COSY-NOESY COSY和NOESY实验组合在一起一次完成获得的谱，记为COCONOSY。脉冲序列为90° $-t_1-$ 90° – 采集FID（t_m）90° – 采集FID（t_2）。在NOESY实验混合期的固定的t_m期间内，第1次采集FID获得COSY信息，接着，在第3个90°脉冲后从第2次采集的FID信号获取NOESY信息。由于COSY，NOESY谱都是正方形图且对称于对角线，于是将对角线为分界线各取一半可装配成一张COCONOSY谱。因此本实验在完全相同的条件下，同时获取了COSY与NOESY的信息，不仅节省了实验时间，

而且方便了谱图的解析。在一张 CO-CONOSY 谱上能方便地完成肽类分子氨基酸残基序列的指认，从而获得蛋白质分子的二级结构的有关信息。参见**同核二维化学位移相关谱**条与**二维核欧沃豪斯效应谱**条。

45°-同核化学位移相关谱 45°-Homonuclear chemical shift correlated spectroscopy; 45°-COSY 同核化学位移相关谱的脉冲序列由两个 90° 脉冲组成，故也称为 90°-COSY。若将第二个脉冲的倾倒角减小，设为 $\beta=45°$ 时，称为 45°-COSY。采用 45°-COSY 实验使相干转移到具有共能级的或直接相连的跃迁上，是转移到不享有共能级的平行跃迁或间接跃迁上的 6 倍。因此减少了平行跃迁间磁化转移强度，限制了多重峰内间接跃迁，对角峰（自身的自相关峰）消失，沿着对角线变窄，减小了对邻近的交叉峰的干扰，有利于复杂分子密集峰群的解析；交叉峰的多重谱线不再呈矩形点阵，而呈现出有一定倾角，利用倾角的方向可识别相关的两个^{1}H 核的耦合常数的正、负号。

同核联锁 homonuclear lock 被测核与控制锁场核属同一种核素，用一条谱线来控制磁场的稳定性，记录其他谱线。参见**场频联锁**条。

同核门控去耦 Homonuclear gated decoupling; HMG 在实验中针对谱图中某一个不希望要的强峰进行辐照，从而使它受到抑制，然后对被测样施加观察射频脉冲 $B_1\left(<\frac{\pi}{2}\right)$随即接收 FID 信号。此法可消除强大溶剂峰（比如水峰）与某些不希望要的谱峰。

同核去耦化学位移相关谱 homonuclear decoupling chemical shift correlated spectroscopy; HD-COSY 也称为 F_1 域宽带去耦的^{1}H—^{1}H 相关谱。是在常规相关谱序列中插入一个 180°聚焦脉冲，将演化期分成两部分，使化学位移重聚，而在 F_1 域实现质子宽带去耦、交叉峰强度增加，提高了 F_1 域分辨率。F_2 域不去耦，仍保留着 J_{HH} 耦合。因此 HD-COSY 图谱 F_1 与 F_2 域都是化学位移，但峰形不再是矩形点阵而呈细条状，与常规相关谱同样解谱。

同核 Hartmann Hahn 实验 Homonuclear Hartmann-Hahn experiment; HOHAHA 能给予一个链上所有质子彼此的全部相关信息的实验。类似总相关谱实验，脉冲序列为

90° $-t_1-$（MLEV-17 组合脉冲）$(\tau_m)-$ 采集 FID(t_2)

混合期 τ_m 是强功率的自旋锁定脉冲。MLEV-17 组合脉冲由 MLEV-16 组合脉冲及其前后各增加一个规整脉冲构成，完成理论所要求的作用。参见**总相关谱**条和**MLE V-16脉冲序列**条。

同核相敏化学位移相关谱 homonuclear phase sensitive chemical shift correlated spectroscopy 利用相循环获得纯吸收型线型相关谱的方法。常规^{1}H—^{1}H 相关谱中的信号强度是用绝对值来表示的，不仅丢失了各个信号的相位正负的信息，而且由于宽

的、单个色散组分的影响使非对角峰信号畸变而拖尾，低截而等高线谱图上呈4个尖角的星形峰，并当化学位移相当接近而又互不存在耦合的情况下，可使处于同一区域内的非对角峰相互重叠，不便解析，利用相循环技术可克服这一缺点。相敏相关谱的对角峰与交叉峰的相位总是相差90°，因此应认真调整谱图相位。为了从谱中获取关于体系耦合的详细信息，应将交叉峰调成吸收型。用这种交叉峰内部峰间相位可找出主动耦合峰和被动耦合峰，对归属谱线，确定耦合常数非常有用。参见**主动耦合与被动耦合**条。

同核自旋回波 *J* 调制 homonuclear spin echo *J* modulation 调制实验所用脉冲序列为 $90°_x - \tau - 180°_y - \tau -$ 采集FID。考虑同核耦合自旋量子数为 $\frac{1}{2}$ 的二旋系统IS。I核的化学位移为 ν_I，耦合常数为 J_{IS}，则自旋二重线的磁化分量记以 a 和 b，分别与S自旋的 $|\alpha>$ 态和 $|\beta>$ 态相对应。$90°_x$ 脉冲使I核两个分量 a，b 同时倒在 y 轴上，但以各自特征频率 $\left(\nu_A - \frac{J}{2}\right)$ 和 $\left(\nu_A + \frac{J}{2}\right)$ 绕 z 轴运动，经 τ 时间间隔它们的相位差为 $2\pi J\tau$。$180°_y$ 脉冲使I核的 a，b 分量绕 y 轴翻转180°，同时S核的 $|\alpha>$ 和 $|\beta>$ 两个态互为变换，I核的 a 分量与S核的 $|\alpha>$ 态对应，脉冲后变成与 $|\beta>$ 态对应，a 分量变成了 b 分量，而 b 分量在脉冲后变成 a 分量，于是在第2个 τ 时间间隔内，a，b 仍以它们的特征频率继续绕 z 轴运动，到达 2τ 时刻，a，b 的相位分别为 $2\pi J\tau$ 和 $-2\pi J\tau$。化学位移的作用因重聚而消失，只出现了与耦合常数 J 有关的作用。这样在旋转坐标系中，具有 J 耦合时回波幅度，是无耦合时的自旋回波幅度 M_y^0 的 $\cos(2\pi J\tau)$ 倍，称为同核自旋回波J调制。这是J分解谱的基本原理之一。

同晶置换法 isomorphous replacement method 晶体结构测定中破解相角问题的一种方法。此法目前主要用于蛋白质结构的测定。所谓同晶置换是指两种或两种以上的晶体，它们具有同样的对称性、相同的空间群、相似的晶胞大小和形状、绝大多数原子的种类及其在晶胞中的位置也相同，只是个别原子用不同的原子置换。在同晶置换法中，置换原子应是重原子。用此法测定含对称中心的晶体结构时，只需一对同晶置换晶体；测定不含对称中心的晶体结构时，则至少需要两对同晶置换晶体，才有可能定出相角。

同离子效应 common ion effect 基于Le Chatelier原理，当在已建立平衡的体系中加入一种或多种已存在的组分时，将使平衡产生移动，并在新的条件下建立新的平衡，此效应称同离子效应。分析化学中常利用同离子效应降低沉淀的溶解度以保证被沉淀离子沉淀完全。例如，为使 Ba^{2+} 或 Ca^{2+} 沉淀为 $BaSO_4$ 或 CaC_2O_4 时沉淀完全，沉淀过程中都需加入过量的沉淀剂 H_2SO_4 或 $(NH_4)_2C_2O_4$。

同时分析 synchronous analysis 通过一次进样或操作，可以同时得到多种组分定性或/和定量结果的分析手段。如离子色谱、气相色谱、液相色谱和发射光谱等。

同位素 isotope 同一元素中具有不同质量数的一些原子品种，在元素周期表中占有同一个位置。英国放射化学家索迪（F. Soddy）根据无法用化学分离手段分开的元素可以排列在周期表同一位置的事例，1910 年首先提出了放射性同位素的概念，1913 年最先使用了"同位素"一词。一般认为，用现代放射性探测器能够测到放射性的同位素称为放射性同位素，不能探测到放射性的同位素称为稳定同位素。同位素的化学性质相似，是同位素示踪法的依据。

同位素变宽 isotopes broadening 由于同位素效应引起的能级超精细分裂，在仪器分辨率较低时，表现为谱线的展宽，称为同位素变宽。大部分化学元素是由一些同位素原子组成，同一种元素的各种同位素其核外电子的数目与排列方式相同，因此，它们之间谱线的粗略结构是相同的。但因质量不同即因同位素效应而使谱线分裂，采用一般分辨率较低的仪器很难将同位素分辨开，从而使谱线相互重叠而变宽。

同位素标记离子 isotopically labelled ion 对组成分子离子的某一元素用特定同位素（例如 ^{13}C、^{15}N 等）进行标记的离子。当研究化合物的裂解、代谢和降解途径时，常用同位素标记离子来示踪；在进行准确定量分析时，也常用相同或类似结构的同位素标记离子作为内标。

同位素地质年代学 isotope geochronology 利用同位素测定岩石、矿物、月岩、陨石样品的年龄，以定量获得地质事件发生和宇宙形成时间的数据资料的一个地质学分支学科。某些长寿命的天然放射性同位素以恒定的速度衰变，在岩石矿物形成后所含这类核素的衰变量是时间的函数，$N = N_0 e^{-\lambda t}$，式中 N_0 和 N 分别是天然放射性核素在岩石、矿物中的原始的和经过 t 时间衰变后的含量，λ 是该核素的衰变常数。只要准确地测定了衰变常数 λ 和该核素衰变后的子体核素的含量 N'，就可以计算出岩石矿物的地质年代 t

$$t = \frac{1}{\lambda}\ln\left(1 + \frac{N'}{N}\right)$$

已用于测定地质年代的母体-子体核素对有 ^{40}K-^{40}Ar，^{87}Rb-^{87}Sr，^{187}Re-^{187}Os，^{238}U-^{206}Pb，^{232}Th-^{208}Pb 等。

同位素分离 isotope separation 一般指从天然的同位素混合物中分离出某种纯的同位素，或把其中某种同位素的浓度相对提高的过程。由于同位素在物理和化学性质上差异极微，故分离极为困难。分离方法有气体扩散法、热扩散法、离心法、电磁分离法、同位素交换法、蒸馏法及电解法等。近年来还有采用激光分离同位素的方法。例如用气体扩散法从天然铀（含 U-235 为 0.71%）中分离重要核燃料 U-235，用电解法从普通水（含

重水 0.02%）中分离重水。

同位素分析 isotope analysis 测定元素的同位素组成。常用的方法是质谱法，可用它来测定稳定和放射性同位素的质量与丰度。采用色谱-质谱联用技术可以进行多组分样品的同位素分析。氢、氮、氧、铀等元素的同位素也可用原子光谱法进行分析。氘含量还可用密度法、折射率法、色谱热导法分析。^{10}B 含量可用中子活化法分析。

同位素激发 X 射线荧光法 isotope excited X-ray fluorescence spectrometry; IEXRF 利用同位素源激发产生的 X 射线荧光进行定性和定量分析的方法。1955 年雷费尔（L. Reiffel）首先进行了同位素激发 X 射线荧光分析。由于同位素源射线强度受限制，只用于能量色散 X 射线荧光光谱仪上。探测器配闪烁晶体或正比计数器可制成携带式仪器，用于野外测量和过程控制，配 Si(Li) 半导体探测器的仪器可进行多元素同时分析和微量元素分析。该法在地质、矿山、冶金、医学、环境、食品检验等部门有广泛的应用。参见 **X 射线荧光法**条。

同位素激发源 radioisotope source 利用放射性同位素衰变过程中产生的 β 射线或 γ 射线，逐出靶原子的内层电子、从而发射 X 射线的 X 射线源。其优点是性能稳定和体积小，缺点是 X 射线强度和荧光产额较低，因此不宜用作晶体色散 X 射线荧光光谱仪的光源，一般是作为 X 射线能谱仪的光源。在 X 射线能谱仪中常用作激发源的同位素有 ^{55}Fe、^{57}Co、^{155}Eu、^{241}Am 等。

同位素离子 isotope ion 在质谱中，除天然丰度最大的同位素之外，其余同位素所产生的离子总称。例如，对由 C、H、O 等原子构成的离子而言，对应于只由最大丰度同位素产生的离子为 M^+，如将含有一个 ^{13}C 及 ^2H 的离子 $[M+1]^+$ 或含有一个 ^{18}O 的离子 $[M+2]^+$ 等。称之为同位素离子。对于分子离子 $M^{\dot{+}}$ 来说，$[M+1]^{\dot{+}}$ 或 $[M+2]^{\dot{+}}$ 等称之为同位素分子离子（isotopic molecular ion）。

同位素谱线 isotope spectrum line 由同位素效应引起的谱线的超精细分裂称为同位素谱线。不同的同位素核质量不同，核质量影响发射谱线的频率或波长，称为同位素效应。

同位素取代法 isotope replacement method 分子中某核以其同位核素选择性地取代时，根据同位素效应引起键的振动频率发生改变，以此推定峰的归属的方法。最常用的方法是氘代法。如 A-H 的氢被氘取代后，A-D 键的振动频率降低，降低幅度大体上与虎克公式计算值接近。

同位素示踪剂 isotope tracer 利用其特征标记以指示和追踪它在化学反应、生态环境、生物体内动态变化规律的同位素或其化合物。稳定性同位素示踪剂以其不同质量数作为标记，放射性同位素示踪剂以其放出的特征射线作为标记。通过观测示踪剂

的行为和变化来研究和追踪某一物质不易或不能辨认的物理、化学和生物过程中的动态行为和分布转移的规律。放射性同位素示踪剂的优点是灵敏度高、操作简便和容易辨认。稳定性同位素示踪剂的优点是没有放射性，不造成环境污染和对生物的辐射损伤；缺点是灵敏度低、测定仪器复杂。

同位素稀释(法) isotope dilution 利用放射性或稳定同位素作指示剂进行化学分析的一种方法。1932 年由赫维西（G. C. de Hevesy）提出。将一已知量 W_0 放射性比度为 S_0（稳定同位素为丰度）的同位素或其标记化合物加入到一定量的样品中，混合均匀之后，用化学方法分离，测量其放射性比度 S_x（或稳定同位素丰度），计算被测物质的含量。因为稀释前后的放射性活度（或稳定同位素的量）相等，$(W_0+W_x)S_x=W_0S_0$，据此可以计算出试样中被测元素或化合物的含量 W_x。根据实验方式不同，有直接放射性同位素稀释法、反同位素稀释法、双同位素稀释法和取代同位素稀释法等。本法的优点是灵敏度高，多数元素达到 10^{-6} g，有些元素可达到 10^{-10} g；避免了定量分离的困难、方法简便快速。主要的限制是有些元素没有合适的放射性同位素指示剂。同位素稀释法已广泛地用于化学、生物化学等领域。

同位素效应 isotope effect 在红外光谱中，同位素效应是指分子中某核素当以其同位核素取代后所导致振动频率改变的现象。如分子中的 OH 或 CH 伸缩振动，当用重氢 D 取代 H 后，其伸缩振动的频率可近似地表示为 $\nu_{x-D}=\nu_{x-H}\left(\frac{m_H}{m_D}\right)^{\frac{1}{2}}$。同位素取代不但引起折合质量改变，还引起力常数的改变。利用同位素取代效应可有助于判断振动频率的归属、确定其同位素的存在与丰度测量。

同位素质谱法 isotope mass spectrometry 用质谱仪器进行同位素准确组成的研究和原子质量测量的方法。主要用于地质年龄测定及天体物质中同位素丰度的测定。随着同位素稀释法和稳定同位素标记技术的发展，同位素质谱法在生物学、临床医学、药学、农学和环境科学方面也都得到了广泛的应用。

同心雾化器 concentric nebulizer 一种气动雾化器。参见**气动雾化器**条。

铜还原直接滴定法 direct titration method with copper reduce reaction 一种测定还原糖的方法。以样品溶液做滴定剂，还原糖与煮沸的碱性酒石酸铜标准溶液（斐林试剂）反应生成氧化亚铜，亚甲基蓝为指示剂，滴定终点为无色，由于与所取酒石酸铜标准溶液相当的还原糖的量（以葡萄糖计）可查表得到，样品中还原糖的含量就可以计算出来。

铜蓝蛋白 blue copper protein 铜蓝蛋白广泛存在于自然界中。质体蓝素（分子量 10500）和抗坏血酸氧化酶（分子量 150000）属于这类蛋白，

它们分别含有一个和几个铜原子。它们的氧化态以深蓝色为特征，即在600nm附近有电子吸收带，可用600nm左右的激发光源测得它们的共振拉曼光谱。在350～470cm^{-1}范围出现的谱带归属为ν（Cu—N）和ν（Cu—O）振动，而在270cm^{-1}附近的弱谱带可能属于ν（Cu—S）振动。从而可提出这类蛋白质的配位结构类型。

铜片试验 copper corrosion test 又称铜片腐蚀试验。检查燃料油或润滑油中是否含有发生腐蚀作用的活性硫化物或元素硫的方法。试验燃料油时，将标准大小的铜片浸入油中，并在50℃时保持3h，然后取出铜片，与标准色板对照，用肉眼观察其表面的颜色。如在浸过的铜片上发现绿色、黑色、棕黑色或钢灰色斑点和小污点时，表明油中含有能引起发动机零件或汽油机系统零件腐蚀的活性硫化物或元素硫。

铜值 copper number 一定量的纺织材料能使氧化铜还原成氧化亚铜的量，以Cu计量，以克为单位。

统计假设 statistical assumption 关于一个或多个随机变量未知分布的假设。如果随机变量分布形式已知、而仅涉及分布中的未知参数的统计假设，称为参数假设。检验统计假设的过程，称为假设检验，检验参数假设的过程，称为参数检验。

统计检验 statistical test 检验和判别给定原假设是否成立的过程。常用的检验方法有t检验、F检验、χ^2检验、偏度-峰度检验、夏皮罗-威尔克检验、柯尔莫哥洛夫检验法、秩和检验、符号检验等。在分析测试中，用上述这些方法来检验异常值、系统误差、精密度的一致性、测量值的分布类型、校正曲线的意义和线性范围等。

统计模拟分光光度法 statistical simulation spectrophotometry 是以随机因素的概率分布为理论基础，用有限但足够的实验数据建立混合体系分光光度测定的数学模型以对实际样品进行数字模拟的分光光度分析方法。统计模拟分光光度法的应用一般分为三步。首先，建立数学模型；其次是产生模拟数据，根据所构造的模型即可在计算机上算出诸组分含量详尽组合的模拟样品溶液的吸光度，存入计算机供测定未知样品含量用；最后测量未知样品的组分含量时，只需测定未知样品在m个波长处的吸光度，即可用主组合检索法准确、快速、方便地找出未知样品各组分浓度。这种方法减少了矩阵求逆的计算，但前期工作量大，且常带有一定经验性。目前此法已被用于两组分和三组分的药物分析。

统计权重 statistical weighting 在原子内部，由于电子的轨道运动与自旋运动的相互作用，使得同一光谱项中各光谱支项的能级有所不同。每一个光谱支项又包含着（$2J+1$）个可能的量子态。当有外加磁场时，由于原子磁矩与外加磁场的相互作用，简并能级分裂为（$2J+1$）个子能级，

一条光谱线在外加磁场作用下分裂为 $(2J+1)$ 条谱线，令 $g=2J+1$，称为统计权重，它决定多重线中各谱线的强度比。

统计推断 statistical inference 根据样本的测试结果，对样本源自的总体的某个或某些特征从统计上进行推断。包括参数估计与假设检验，前者是指随机变量分布函数已知，根据样本数据估计总体参数的值；后者是根据样本数据来检验关于总体参数的假设，以判断总体分布是否具有指定的特征。

筒镜分析器 cylindrical mirror analyzer; CMA 能量分析器的一种。它由两个同轴圆筒组成，外筒加负电压，内筒接地。扫描电压叠加于分析器两圆筒的电压上，样品和探测器沿两圆筒公共轴线放置，沿空心内圆筒周上有入口和出口狭缝，电子受减速场减速后穿过入口狭缝，受到内外筒之间径向场作用，相同能量的电子聚焦于出口狭缝，然后进入探测器。该类能量分析器对俄歇电子有较高的传输效率，经常用在俄歇电子能谱仪上，但其能量分辨率比半球形能量分析器要低。

投影镜 projection mirror 透射电子显微镜成像系统的一部分。投影镜是三级透镜成像系统的最后一个透镜，是一个强激磁、短聚焦透镜，将中间镜像放大并投射在荧光屏或照相底片上。为了确保成像系统有足够高的放大倍数，投影镜应提供尽可能大的放大倍数。

透镜 lens 用透明材料制成、能转折光线传播方向或改变光束会聚程度、使光束发散或会聚成像的光学元件。透镜有两个不同形状（球面、非球面或平面）的透光面（经过研磨和精细抛光，有时还镀覆有各种特殊透光薄膜层），光线依次在其两面上发生折射；按透镜使入射光束会聚或发散的性能分为会聚透镜和发散透镜两大类（也称为正透镜和负透镜）。透镜的主要光学参数为：两面的曲率半径 r_1 和 r_2、通光口径 D、中心厚度 d、折射率 n（对某一波长光）、焦距 f'（正透镜焦距为正值、负透镜为负值）。透镜可单独使用，在复杂、高质量光学系统中则有多块不同的透镜联合工作，获得高质量光学效果。

透镜的放大率 magnification of lens 透镜使光线转折因而可以使物体成像，高度为 h 的物体经透镜形成高度为 h' 的像，因此透镜具有放大率。以 $\beta=\frac{h'}{h}$ 表示透镜垂轴放大率（即在垂直透镜光轴方向度量的放大率）。在光学中，还可沿光轴方向度量透镜的放大率，称为纵向放大率 α；也可以光线经过透镜折射前、后的角度关系表达透镜的放大率，称为角放大率 γ。这三个放大率表达，各有用处；对同一对物点和像点，可以证明 $\alpha\gamma=\beta$。

透射电子 transmission electron 当电子束照射样品时，电子束会产生散射效应，包括弹性散射和非弹性散

射。只要样品足够薄，未经散射的电子就可以穿过样品构成背景，而像的衬度则取决于样品各部分对电子的不同散射特性。在透射电镜中主要利用透射电子来成像，因此，透射电镜要求的样品比较薄，这样才可以使比较多的电子透过以形成具有一定亮度的图像。

透射电子显微镜 transmission electron microscope; TEM 一种以波长极短的电子束作为照明源，用电磁透镜聚焦透射电子成像的具有高分辨本领、高放大倍数的电子光学仪器。透射电镜一般利用未经散射的电子构成背景，而利用样品各部分对电子的不同散射特性来构成衬度。一般透射电镜由电子光学系统、电源和控制系统和真空系统三部分组成。在各种显微镜中，透射电子显微镜性能最高，广泛运用于微观分析当中。一般透射电镜具有100万倍以上的放大能力，可以观察到晶格结构。TEM不仅可以观察样品的形貌和颗粒大小，还可以利用电子衍射判断晶体结构以及利用能谱进行微区的成分分析，是纳米材料研究的最有效工具之一。

透射电子像 image of transmission electron 在X射线微区分析中利用透射电子信号构成的显微扫描图像。在分析中，用电子束扫描样品表面的一定区域，同时用探测到的背散射电子信号来调节阴极射线管的亮度，得到样品表面的形态分布图。采用透射电子像有两个目的：第一，它是配合X射线分析而对样品表面物质进行的一种辅助观察手段。第二，扫描电子显微镜的透射电子像与透镜成像法形成的像有不同的特点。

透射率 transmittance 亦称透光度，简记为T。当一束平行的单色光通过任何均匀、非散射的固体、液体或气体介质时，透过光的强度I与入射光的强度I_0之比，称为透射率或透光度，并常以百分数表示有百分之多少的光透过，即

$$T=\frac{I}{I_0}\times 100\%$$

透射率直接与试样特性有关。对某一具体试样，透射率不但与透光试样的厚度(光行程长度)有关，且还是入射光波长的函数。因此，不同物质对同一波长入射光的透射率不同，同一物质对不同波长入射光也有不同透射率。

透射散射电子 transmission scattering electron 高能电子入射固体样品，与原子核和核外电子发生弹性和非弹性散射过程，如果样品的厚度比入射电子的有效穿透深度小得多，将有相当数量的入射电子能够穿透样品而被装在样品下方的电子检测器所检测。这样检测到的透射电子中，除了能量不变的弹性散射电子外，还有各种不同能量损失的非弹性散射电子。

透射形貌术 transmission topography 采用单色X射线为入射辐射，测定透射X射线强度，进而了解晶体缺陷的形貌术。最主要的实验方法是

兰氏形貌术（Lang topography），其特点是非破坏性，而且所研究的晶体可以大到5cm以上，特别适用于研究大块晶体中缺陷的分布、组态等；缺点是曝光时间长，分辨率不够高。兰氏形貌术能观测到晶体内部的位错、层错、杂质分凝等微观缺陷和亚晶界、孪晶界、磁畴壁、电畴壁、生长带、长程应力场等，是X射线形貌术中应用最广泛的技术。

突变作用 mutation 遗传物质的一种明显的可遗传的变化，通常指单个基因的变化（点突变），也适用于染色体的畸变。突变有两种，一种是由DNA复制错误引起的突变，称为自发突变；另一种是因物理或化学作用源诱导产生的突变，称为诱导突变。突变可使遗传发生变异，从而产生有利于生物进化的演变，但同时也会产生有害的突变。如染色体改变；多肽链上的氨基酸顺序改变；或DNA的一个核苷酸成为另一个核苷酸，一个或一个以上的碱基缺损引起相应的信使RNA的变化等。

图表线 normal line 在X射线荧光光谱学中，由满足选择定则的电子跃迁产生的谱线。因为这类电子跃迁可以非常简捷地用能级图表示而得名。

图像处理 image treatment 在电镜中对所得到的电镜数字图像进行的处理。因为电镜的成像信息是来自入射电子和物质相互作用所产生的各种信息，而入射电子又具有一定的波动性，加之在成像过程中还存在各种降低图像质量的因素以及在镜筒和显像管中电子束扫描的非线性等，都使图像质量降低，为了改善图像质量应进行图像处理。图像处理主要包括：几何畸变的校正；消除机械震动的噪音；改善图像的衬度；改善图像边缘的清晰度；提高图像的信噪比；改善图像的分辨率等。

图像畸变 image aberration 在电镜中电子像与实际样品的几何形状的失真。图像的畸变在某种程度上是电镜本身所固有的，例如在镜筒中和显像管中电子束扫描的非线性等均会造成图像畸变。对于图像畸变，可以由计算机等处理来纠正。

涂壁毛细管柱 wall coated open tubular column; WCOT 把固定液直接涂渍到毛细管柱的内壁作为固定相进行分离的色谱柱。长度约为10～100m，内经0.1～0.8mm，液膜厚度0.15～5μm。和填充色谱柱相比，其分离效率高，分析速度快，样品用量少，应用广泛。但由于样品负荷量较小，经常需采用分流进样技术，对定量的准确度有一定的影响。

涂布器 spreader 又称铺层器。涂铺薄层板的一种装置，有手动和自动两大类型，主要用于薄层色谱。利用它可将吸附剂或其他要铺薄层的物质制成的浆状物均匀地平铺成薄层板。

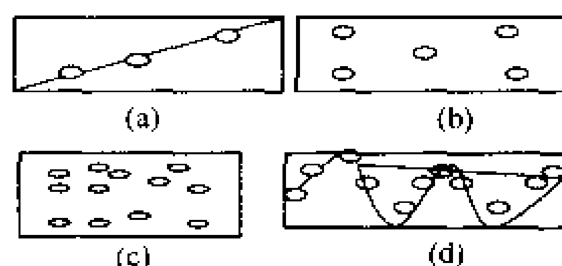
涂层毛细管 coated capillary 在内壁涂渍有亲水聚合物（如聚丙烯酰胺、聚乙二醇等）的毛细管。

涂渍 coat 为了对毛细管改性，通常在管壁涂渍亲水聚合物，如聚丙烯酰胺、聚乙二醇等的操作。

涂渍效率 coating efficiency 也称理论效率利用率，是衡量一根毛细管柱的柱效率达到理论值的程度，以 Ce（%）来表示 $Ce = \frac{h_{min}}{h} \times 100\%$，式中，$h_{min}$是理论最小板高，$h$ 是实测最小板高。对于典型的 WCOT 柱 Ce 在 20% ~ 60%，对 SCOT 柱 Ce 为 40% ~80%。

土壤饱和含水量 soil saturated moisture capacity 土壤中的孔隙全部都充满水分时的土壤含水量，其中包含重力水。它代表土壤最大的容水能力。土壤饱和水对确定改良盐渍土时的洗盐定额和计算出水率（出水率 = 饱和水 − 田间持水量）以及设计排渠道等都有重要意义。目前多采用环刀法测定土壤饱和水。也有用土壤总孔隙度来代替土壤饱和含水量，但因封闭孔隙的存在，往往会使计算值偏高。参见环刀法条。

土壤采样 soil sampling 为进行土壤的化学和物理分析测定而采集土壤样品的方法和操作，主要包括采样布点和采样器的使用等。由于土壤自然条件、类型及污染情况和研究目的不同，采样方法也不同。就布点而言，有对角线法、梅花形法、棋盘式法和蛇形法（见右图）。采集土壤样品的时间和数量，则视采集的对象和目的而定。



采样布点法

（a）对角线采样法：适宜于污水或受污水灌溉的田块的进水口向对角线引一射线，并将此射线划分为3等份，在每等份的中央点作为采样点。根据田块和地形条件，可作适当变动。

（b）梅花形采样法：适用于面积较小、地势平坦、土壤较为均匀的情况，可设5～10个采样点。

（c）棋盘式采样法：适宜于中等面积的田块，地势平坦地形完整，但土壤较不均匀的情况，可设10个以上的采样点。

（d）蛇行采样法：适合于面积较大，地形不太平坦土壤不够均匀的田块，可布设较多的采样点。

土壤采样器 soil sampler 采集土壤样品的器械。种类很多：采集农地或荒地表层土壤样品，可用小型铁铲；研究土壤一般物理性质，如土壤容重、孔隙率和持水特性等，可利用环刀。环刀为两端开口的圆筒，下口有刃，圆筒的高度和直径均为 5cm 左右。最常用的采样工具是土钻，土钻分手工操作和机械操作两类，都是使钻体进入一定深度的土壤，然后将土柱提上，平放观察，按需要切割采样。

土壤分析 soil analysis 用土壤学与物理、化学和生物学相结合的理论和技术，测定土壤的物理、化学、矿物学、微生物学、酶学和肥力的组成及性质的技术和方法。土壤分析为土壤学研究以及与作物生产、净化环境有关的土壤管理提供必需的信息。土壤分析通常包括全氮、全钾、全磷的测

定，有时还需要测定土壤的有效营养成分的含量。广义的土壤分析还包括土壤水、灌溉水和生长于土壤中的各类植物的组分、特别是营养成分的分析。

土壤空气测定 determination of soil air 土壤中 N_2、O_2、CO_2、CH_4 和 NO 等各种气体，总称为土壤空气，它们一般以自由态、吸附态和溶解态存在。土壤空气的数量、组成及其更新对植物生长、土壤中的生物学和化学过程、养分的转化与有效性以及对环境都有重要影响。土壤空气测定包括土壤空气的容量、组成和通气性强弱的测定。空气的容量取决于土壤颗粒的排列状况和含水量，一般采用土壤密度和容量计算土壤总孔隙度然后减去持水孔隙度求得。测定空气组成的方法有气量法和仪器分析法（如气相色谱法）。

土壤毛细管持水量 soil capillary water holding capacity 土壤颗粒间微孔隙所吸引和保持的水分。它与其他土壤水分常数，如最大吸湿水、田间持水量等不同，受外界因素的影响较大。一般认为，毛细管水的上限相当于饱和水，而下限接近于薄膜水。这个范围内的水分，依据其在毛细管中存在的状态，可分为毛细管支持水、毛细管悬着水和薄膜悬着水。毛细管水的移动速度和高度与土壤毛细管直径有关，土壤毛细管持水量可用环刀法测定。参见环刀法条。

土壤渗透系数 soil permeability coefficient 土壤渗透系数 K（$ml \cdot cm^{-2} \cdot min^{-1}$）通常都按达西公式进行计算，即

$$K=\frac{10 \cdot Q \cdot L}{S \cdot t \cdot H}$$

式中，H 是水层厚度，cm；L 是土柱长度，cm；Q 是渗透量，ml；S 是渗透横断面积，cm^2；t 是渗透时间，min。土壤水分的运动还与温度有关，为了便于统一对比，通常都按 10℃ 时的结果为基准，不在 10℃ 时所得的渗透系数要按哈赞公式进行换算

$$K_{10}=\frac{K_t}{0.7+0.03 \times t}$$

式中，K_{10}是 10℃ 时的渗透系数；t 是渗透时的温度，单位为℃；K_t 是温度为 t 时的渗透系数；0.7 和 0.03 是经验数值。测定渗透系数的方法，在田间用渗透筒法和渗透管法，采集原状土在室内进行测定有原状土柱法及环刀法。土壤渗透系数是研究水分运动规律、灌溉排水和水土保持的基本参数。

土壤水分常数 soil water constant 反映土壤水形态和性质的转变点的几个特征性含水量。在一定程度上也反映相当的土壤水量水平。各个土壤水分常数的含水量值主要决定于土壤的质地和孔隙状况，较普遍应用的土壤水分常数有：最大吸湿量（曾称为吸湿系数）、凋萎含水量（也称为萎蔫系数）、毛细管持水量、田间持水量和饱和含水量等。

土壤水分监测 soil moisture monitoring 土壤中各种液态水分的测定，有时还包括冰和一部分矿物结晶水在内。监测方法有采样法、原位法和航

天遥感。采样法多数是采样到室内测定，也有在田间采样速测的，测定方法有烘箱法、酒精燃烧法、红外光谱法，近红光谱法等。原位监测法是利用仪器设备直接在田间测定土壤含水量，测定方法有中子仪法、γ射线法、规块电测法、张力计法、湿度传感器法、光学方法等。遥感法是利用航空遥感和卫星遥感技术，测得土壤表面反射的电磁波来估测土壤含水量。

土壤田间持水量 soil field capacity 田间条件下，重力水排除后土壤保持的最大水量。以土壤质量（或容积）含水量表示。应用田间持水量的数据可以计算规定面积某一土层（如 $1hm^2$ 的耕层）内的最大储水量、灌水定额或排水定额。以田间原位原状条件下的小区淹灌法为标准方法，其余方法所得结果应与之比较，以确定适用与否。常用的测定方法有小区淹灌法、多年定位观察法、土柱法、土壤吸力（水势）测定法、容重剖面法等。

土壤田间最大持水量 maximum soil filed capacity 土壤的上层毛细管所能保持的毛细管悬着水的最大量。它减去土壤凋萎温度的水分含量即为土壤的有效含水量。一般认为土壤的最佳有效含水量为田间持水量70%左右（稻田除外）。就是说土壤中的含水量保持在田间持水量和最佳有效含水量之间时，最适合植物生长发育。

土壤污染监测 soil pollution monitoring 对土壤中各种金属、有机污染物、农药与病原菌的来源、污染水平及积累、转移或降解途径进行的监测活动。土壤污染的优先监测应是对人群健康和维持生态平衡有重要影响的物质。如汞、镉、铅、砷、铜、铝、镍、铬、锰、硫酸盐、硝酸盐等元素和无机污染物；石油、有机磷和有机氯农药、多环芳烃、多氯联苯、三氯乙醛及其他生物活性物质；由粪便、垃圾和生活污水引入的传染性细菌和病毒等。土壤中的有机类和无机类污染物在实验室用重量法、容量法、化学法或仪器法进行测定；细菌和病毒用生物检测方法进行测定。土壤污染监测结果对掌握土壤质量状况，实施土壤污染控制防治途径和质量管理有重要意义。

土壤营养成分测定 determination of soil nutrients 土壤中可被植物吸收利用的养分称有效养分，分析它的目的在于评价和监测土壤肥力（养分）水平和动态，测定法有生物和微生物学方法、化学浸提法和物理化学法等。微生物学法开始用于磷、钾、钙、镁和几种微量元素的测定，现广泛用于氮的矿化量研究。土壤营养成分测定项目包括C、O、H、N、P、K、Ca、Mg、S、Fe、Mn、Mo、Zn、Cu、B、Cl等16种元素。化学浸提法是用某种化学试剂（浸提剂）浸提土壤，并测定“可浸出的”养分。早期所用的浸提剂是模拟植物根系的分泌物，随着土壤化学和植物营养的研究进展，逐渐演变为用某种浸

提剂作短时间的一次平衡浸提，或运用离子交换树脂、同位素交换、吸附平衡、电渗析、电超滤或非平衡浸提等技术，只要它的测定值与植物吸收养分量（或产量）有很好的相关性即可，不一定要求出植物吸收量的绝对值。这些营养元素的测定主要用仪器分析方法来完成，包括元素分析仪、ICP-AES、ICP-MS、流动分析仪等。

土壤有机质测定 determination of organics in soil 土壤中所有有机物的总量测定。测定土壤有机质的方法很多，主要是通过测定土壤中有机质氧化后释放出的 CO_2 量、碳氧化时消耗的氧化剂的量、或在 350～400℃低温灼烧后的减量来确定土壤有机质的含量。可用干烧法或湿烧法氧化土壤中有机质，测定碳氧化时消耗的氧化剂量的方法有：（1）外加热法，即在 170～180℃煮沸 5min，氧化率为 90%～95%，是我国通用的常规分析法；（2）水合热法，国际上常用的方法，最高氧化温度为 120℃左右，氧化率约为 60%～86%之间，受土壤类型及室温的影响较大，平均为 75%～77%左右。适合于在 20～30℃室温条件下进行，重现性好；（3）比色法，一般用于土壤有机质的快速测定；（4）低温灼烧法，适用于有机质含量少的沙质土壤。

土壤中氮素的测定 determination of nitrogen in soil 土壤中的总氮和有效氮的含量是常规分析项目，此外，速效氮、铵态氮、硝态氮的含量也是农业生产和植物营养分析中的重要指标。全氮含量测定有杜氏法和凯氏定氮法；有效氮的标准方法是微生物分解法，化学法作为一种速测方法；硝态氮的测定可用酚二磺酸比色法、还原蒸馏法、硝酸根电极法；在土壤中铵态氮测定的方法有甲醛法、中和法、纳氏试剂比色法、靛酚蓝比色法、扩散吸收法、直接蒸馏法、氨电极法等。目前，仪器分析方法在氮素测定中应用越来越普遍，包括流动注射分析和紫外分光光度法、^{15}N 同位素标记质谱测定法等。

土壤中全磷 total phosphorus of soil 即土壤中磷的总含量。可分为有机磷和无机磷两大类，其中无机磷主要以 Ca、Mg、Fe、Al 等形态结合的磷酸盐；有机磷以卵磷脂、核酸、磷脂为主，此外还有少量吸附态和交换态磷。农业生产中还常分析有效磷的含量。测定土壤中磷的主要方法是磷钼蓝比色法和钼锑钪比色法。

土壤自然含水量 soil moisture 土壤水分大致分为化学结合水、吸湿水和自由水三类。自由水是可供作物利用的；吸湿水是土粒表面分子力所吸附的单分子水层，只有在转变为气态时才能摆脱土粒表面分子力的吸附；而化学结合水却要在 600～700℃下才能脱离土粒。土壤水分含量的多少，直接影响土壤的固、液、气三相比例，以及土壤的适耕性和作物的生长发育。

土壤自然含水量测定 determination of soil moisture 在野外采取的新

鲜土壤样本中，都含有一定量的水分，其中除含有吸湿水以外，还会含有膜状水、毛管水。所含土壤水的类型和数量，要依采样当时的自然环境和含水的状况而定，一般将这种不定态的土壤水分含量称为自然含水量，或称田间含水量。测定土壤含水量的方法有多种，常用的方法有：（1）烘干法，称取一定量样品放入已知质量的铝盒中，在105～110℃烘箱内烘至恒重，从烘箱取出放入干燥器内冷却后，称量，这是测定土壤含水量的通用方法；（2）红外线法，将样品放在红外线灯下蒸发水分，迅速烘干，测定失水量，方法快速简便；（3）酒精燃料法，用酒精在样品中燃烧，使水分迅速蒸发，全过程只需20min，很适合田间测定。

土壤最大分子持水量 soil maximum moisture capacity 吸附在土粒表面，为土粒表面吸附力和分子力所保持的最大水量，亦即薄膜水含量。它与土壤的矿物组成、分散度、腐殖质和水溶盐等因素有关。测定土壤最大分子持水量，可为确定土壤中植物能利用的水分常数及盐土地区临界水时参考。目前，黏性土的最大分子持水量的测定，大多根据薄膜平衡的原理，利用样品与滤纸之间毛细管力和分子力的相互作用，除去超出最大分子持水量的其余水分，剩余的土壤水分含量即是所需测定的土壤最大分子持水量。

土壤最大吸湿量 soil maximum hygroscopicity 风干状态的土壤，置于饱和的水蒸气中，土粒周围所能保持的最大数量水汽分子的水叫最大吸湿水，其含量称最大吸湿量。土壤最大吸湿量与土壤质地和有机质含量有关。土壤质地越黏，有机质含量越高，土壤最大吸湿水含量就越高。通过土壤最大吸湿水的测定，可以间接地算出土壤的凋萎湿度。土壤最大吸湿水与土壤凋萎湿度的关系，一般是粗砂土到中壤土，其凋萎湿度为最大吸湿水的2倍；重壤土为1.5倍；黏土则为1.25倍。测定土壤最大吸湿水对掌握适宜的灌溉时间是很重要的，测定方法一般可用10% H_2SO_4 溶液测定法或饱和 K_2SO_4 法测定。

吐温 tween 商品名，一类非离子型表面活性剂。聚氧乙烯（n）失水山梨醇单（多）酯。根据分子中聚氧乙烯链 n 的长短和形成酯时的酸的不同，分为不同的类型，如：聚氧乙烯（20）失水山梨醇三硬脂酸酯称为tween-20；聚氧乙烯（20）失水山梨醇单棕榈酯称为tween-40；聚氧乙烯（20）失水山梨醇单硬脂酸酯称为tween-60；聚氧乙烯（20）失水山梨醇单油酸酯称为tween-80；聚氧乙烯（5）失水山梨醇单油酸酯称为tween-81等。

退卷积 deconvolution 一种数学处理方法，作用在于：（1）去除对峰的线宽有贡献的某些因素，如X射线线宽、分析器增宽等；（2）通过对谱的退卷积以除去能量损失背景。一般可以通过计算机模拟来

进行处理。

退偏比 depolarization ratio 描述物质拉曼散射光的偏振性能改变的程度，定义比值：$\rho = I_{\perp}/I_{//}$，式中 $I_{\perp} = Iy$，$I_{//} = Iz$［见**线偏振光**条图(a)］。入射光为线偏振光时，ρ 值在 0～0.75 之间；当入射光为圆偏振光时，ρ 值在 0～6/7 之间。

褪色光度法 discolour spectrophotometry 利用被测组分对某显色反应体系颜色的褪色作用，根据加入被测组分前、后体系吸光度减小的程度与被测组分浓度的关系，实现被测组分定量测定的方法。

吞噬细胞发光 phagocytic luminescence 吞噬细胞后发生一系列的代谢过程，通过氧的部分还原产生一组高反应能力的杀菌物质。用液体闪烁计测量发现，与呼吸爆发相伴随的吞噬过程会发光，这种发光现象称为吞噬细胞发光。嗜中性白细胞是血液中的主要吞噬细胞，它移动活泼，局部组织发生急性炎症时，能够迅速穿过毛细血管进入组织中吞噬异物，在防御感染中起着重要的作用。嗜中性白细胞吞噬颗粒物质产生活性物质，能瞬时杀灭颗粒物质，并使细菌上不饱和脂肪酸氧化，产生激发态，退激时产生闪光。吞噬细胞的发光已经引起医学工作者的关注，用发光指标可以评价机体的免疫功能。

吞噬指数 phagocytic index 分两种：（1）检测活体内单核吞噬系统活性的一种方法。它通常用一个常数 K 来代替，表示动物从血中清除炭粒的速率，与注入炭粒的剂量成反比。（2）该术语也用于体外吞噬能力的各种检测方法。

拖尾峰 tailing peak 指色谱峰形状前沿陡峭而后沿拖尾的不对称色谱峰。它是色谱分析中经常出现的峰形。在分配色谱法中，如果载体表面具有活性作用点、进样量超过柱负荷或进样方法不当等都会出现拖尾峰。在吸附色谱法中，如果吸附等温线为非线性的向下弯曲的郎格缪尔吸附等温线时，则在进样量超过一定量时就会出现拖尾峰。

拖尾因子 tailing factor 是用于评价色谱柱惰性（活性）或惰化程度的一个参数。由于柱内存在活性部位，其表征为色谱峰的拖尾和响应值的降低。拖尾因子指在 10% 峰高处的前峰宽 a 与后峰宽 b 的比值，以 Te（%）表示 $Te = \frac{a}{b} \times 100\%$。拖尾因子还可用于描述峰的不对称程度。不对称因子 A_s 也用来描述不对称色谱峰拖尾的程度，其表达式为$A_s = \frac{a+b}{(a+b)-(a-b)}$。

脱气装置 degasser 在液相色谱中，用来脱除流动相溶液中溶解气体的装置。因为流动相中的溶解气体往往会给色谱分析带来麻烦，如气泡进入检测器后会引起检测信号的突然变化，小气泡慢慢聚集所形成的大气泡进入流路或色谱柱中会使流动相的流速变慢或出现流速不稳定，致使基线起伏。所以，流动相输送至色谱体系

之前要先脱气。

脱氧核糖核酸电化学传感器 DNA sensor 利用电化学转换器监测 DNA 分子杂交过程的传感器。

脱氧核糖核酸酶 deoxyribonuclease；DNase 一种耐热的胞外脱氧核糖核酸酶，主要由葡萄球菌属的凝固酶阳性菌株产生。凝固酶和脱氧核糖核酸酶的产生之间有着高度的相关性。葡萄球菌脱氧核糖核酸酶切断 DNA 形成 3′-核苷酸。钙离子作为激活剂，在 pH 9.0 左右表现最适性。脱氧核糖核酸酶试验，用于提供致病性金黄色葡萄球菌诊断的推定性证据。

脱氧雪腐镰刀菌烯酮 deoxynivaenol 即呕吐毒素。是 F. 镰刀菌霉（主要是 *F. graminearum* 和 *F. culmorum*）的二级代谢产物，化学名为 3α，3β，7α，15-四羟基镰草和镰刀菌-9-烯-9-酮。这类真菌大多在低温、潮湿和收割季节，在谷物庄稼中慢慢生长。它一般在大麦、小麦、玉米、燕麦中的浓度较高，在黑麦、高粱、大米中的浓度较低。它毒性较低，但最易出现，因此在谷物中呕吐毒素发病率最高。其中毒症状为厌食、呕吐、消化道发炎、白血球下降、白尿、运动失调、内脏出血、中枢神经系统细胞变质，在细胞生长上表现出抑制蛋白质和 DNA 的合成。它常与其他真菌毒素同存，从谷物和饲料中分离出来的呕吐毒素的最高浓度可达 92 $\mu g \cdot g^{-1}$。一般要求动物饲料中的呕吐毒素不得超过 2$\mu g \cdot g^{-1}$，而人类消费品中的含量不得超过1$\mu g \cdot g^{-1}$。呕吐毒素的检测方法有质谱、荧光、薄层色谱、HPLC、气相色谱、酶联吸附免疫、免疫亲和柱-荧光、免疫亲和柱-HPLC 法等。

脱质子化分子 multiply deprotonated molecule 由中性分子（M）失去一个或多个质子生成的多价负离子，用 $[M-nH]^{n-}$ 表示。

椭圆和圆偏振光 elliptical and circular polarized light 自然光经过偏振镜起偏成为偏振光后，如果光的电矢量的取向不断在旋转，而且其振幅大小也随时变化，其端点的运动轨迹是椭圆，则这种偏振光称为椭圆偏振光；如果电矢量方位不断旋转，但其振幅大小却不变化，则其端点的运动轨迹是一个圆，这就变成圆偏振光，它是椭圆偏振光的一个特殊情况。椭圆偏振光电矢量的端点轨迹椭圆可以有不同的取向方位，其长、短的比例也可以变化（在短轴长度等于 0 时，又出现特殊情况即变成线偏振光了）。

唾液汗液色牢度测定 testing of colored toys for resistance to saliva and perspiration 对于有可能被儿童放入口中或者适用于佩戴在儿童裸露皮肤上的有色玩具需要做唾液汗液色牢度检测。通常采用德国标准（DIN53 160），配制一份碱性溶液，主要成分为 $NaHCO_3$，配制一份酸性溶液，主要成分为 NaCl 和乳酸，用两条滤纸分别浸入碱性溶液和酸性溶液，然后直接接触有色玩具，在（40±2）℃的水上放置 2h，若滤纸有颜料痕迹，就是“不耐唾液和汗液”；反之，则是“耐唾液和汗液”。

W

外标法 external standard method 色谱分析中的一种定量方法，它不是把标准物质加入到被测样品中，而是在与被测样品相同的色谱条件下单独测定，把得到的色谱峰面积与被测组分的色谱峰面积进行比较求得被测组分的含量。外标物与被测组分同为一种物质但要求它有一定的纯度，分析时外标物的浓度应与被测物浓度相接近，以利于定量分析的准确性。

外毒素 exotoxin 细菌在生长繁殖过程中分泌到菌体的一种有选择性毒性作用的蛋白质，由多数革兰阳性菌和少数革兰阴性菌产生。

外加电位 applied potential 一个电解池中两个电极（使用完全相同的两根导线）间实际测出的电位差。外加电位分作两个电极电位，每个电极电位又包括下列内容：溶液主体和电极的导电物质的内部间的电位差，溶液中的 *IR* 降和电极中的欧姆电位降。

外锁 external lock 被测核试样与控制锁场核在静磁场中探头的不同位置上。由于不同位置的磁场强度均匀性及其稳定性不尽相同，因此控制精度较差，但操作简单，每更换样品时不会引起失锁，不需要重新调节锁场控制系统。

外梯度 outside gradient 又称低压梯度。参见**低压梯度**条。

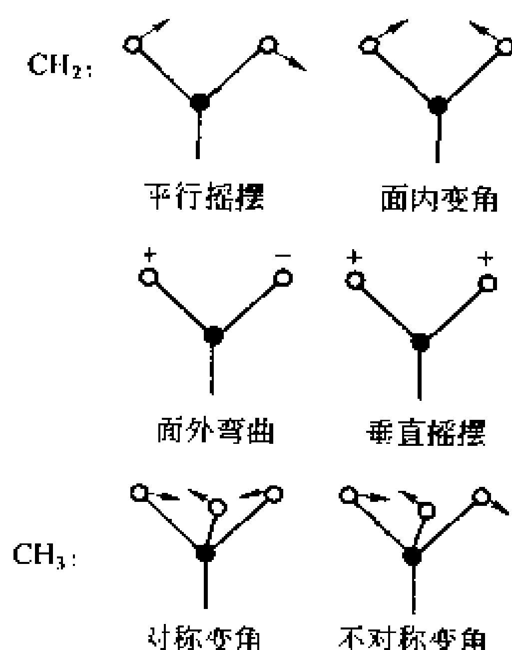
外向型受体 exo receptor 反应官能团朝向受体外侧方向的受体。由于它朝外与客体分子产生互补性分子间作用，因此可以形成主客体的二聚、三聚或更多个分子的超分子集合体。根据分子设计的不同，还可形成空间结构的无限重复，即结晶。参见**内向型受体**条。

外重原子效应 external heavy atom effect 于磷光测定体系中加入含有重原子的试剂或溶剂可以增加 T_1 态粒子的布居数，有利于磷光的发生和磷光量子产率的提高，这种重原子效应称为外重原子效应。外重原子试剂一般不需要自行合成，只要注意与待测分子和除氧剂（如 Na_2SO_3）的相容性，选择合适的市售试剂即可。如碘乙烷、碘化钾、硝酸亚铊等。

弯晶单色器 curve crystal monochromater 利用曲面晶体对 X 射线进行波长色散的光学器件。由于根据光学原理将色散晶体弯成或磨成具有一定曲率半径的曲面，使符合衍射条件的谱线会聚到一条线或一个点上，在同样条件下，所得到的单色 X 射线的强度远比平面晶体所得的大，在 X 射线光学上起到了“强聚焦”的作用。弯晶单色器根据晶体聚焦的程度可分为全聚焦型和半聚焦型。

弯曲振动 bending vibration 泛指引起键角改变的振动，有时也称变形振动，因此泛指时用符号 δ 表示。键角在面内张开合拢的振动为剪动，特指时记以 δ。基团作为整体在基团所

在平面内同时向左或向右摆动，但基团的键长键角均不变化，为面内摆动振动，记以 r，特指时记以 β。这两种振动都是在同一平面内进行，统称为面内弯曲振动，记以 $\delta^{面内}$，有人记以 β。基团作为整体几个化学键的异端同方向离开分子所在平面摆动为仰动，记以 π 或 ω。基团作为整体几个化学键的异端反方向离开分子所在平面的运动称为扭旋运动，这两种振动都是在平面外进行，统称为面外弯曲振动 $\delta^{面外}$，有人记以 γ。对于 CH_3—有对称变角振动和不对称变角振动、面外扭旋振动（扭转，记以 τ）等；对于 CH_2—有面内变角振动（剪动）、面外扭旋振动（扭绞，记以 t）、垂直摇摆振动（仰动）和平行摇摆振动（面内摆动振动）。弯曲振动的力常数比伸缩振动的小，使得同一基团的弯曲振动都出现在伸缩振动的低频端。如下图。



完全激发 complete excitation 若微波脉冲足够短、足够强，它覆盖的频率范围远远大于 ESR 谱中超精细裂分各峰的频率范围，使自旋体系中所有的跃迁可同时发生。这就称为完全激发。有时在适当条件下，可使某一自旋包发生完全激发，而此时并不发生整个非均匀增宽 ESR 谱线的完全激发。

完全抗原 complete antigen 具有免疫原性和反应原性的物质，如大多数蛋白质、细菌、病毒等。一般地说，抗原物质由两个不同的功能部分组成，一个是只具有特异反应原性的小分子物质，即半抗原；另一个是与半抗原结合从而具有免疫原性的大分子物质，即载体。

完全随机化设计 completely randomized design 一种试验设计方法。将所有欲考察的因素随机地安排在各试验中，试验按随机次序进行。其特点是安排试验简便，试验重复次数不受限制，数据处理方法简单。当试验规模大时，各试验之间的差异大，会使实验误差过大，有碍于因素效应的判断。

玩具有害元素检验 toxic elements test for the toy 过量的有害元素会影响儿童的发育，损害儿童的身体健康，所以各国的玩具安全标准都要求检测玩具中的有害元素（如锑、砷、钡、镉、铬、铅、汞、硒等）的含量，并规定了各种有害元素的限量标准，包括有害元素总量和可转移元素含量的检验。

万用指示剂 universal indicator 为用指示剂法测定较宽的范围的 pH 值，由多种单一指示剂按一定比例混合配制而成。例如，采用甲基红，1-萘酚，百里酚酞，酚酞，溴百里酚蓝等指示剂配制而成的一种万用指示剂。其 pH 值与颜色的关系如表所示。

pH	4	5	6	7
颜色	红	橙-红	黄	绿-黄
pH	8	9	10	11
颜色	绿	蓝-绿	蓝-紫	红-紫

网织红细胞校正值 corrected reticulocyte count 参见**网织红细胞生成指数**条。其计算公式为

$$\text{网织红细胞校正值}=\text{网织红细胞比值}\times\frac{\text{病人红细胞比容}}{\text{正常人红细胞比容}}$$

网织红细胞生成指数 reticulocyte production index; RPI 用于校正贫血时幼稚网织红细胞提前进入末梢血液的假象。由于实验证明网织红细胞在外周血成熟时间（天）与其红细胞比容成反比，因此需要根据患者贫血程度予以校正。其计算公式为

$$RPI=\frac{\text{网织红细胞比值}\times1000}{2}\times\frac{\text{病人红细胞比容}}{\text{正常人红细胞比容}}$$

式中，正常人红细胞比容，男性为 0.45，女性为 0.40。

网状结构 reticular structure 有机高分子交联共聚得到的共聚物在空间结构上所具有的网状立体构造。由苯乙烯和二乙烯基苯交联共聚得到的树脂就是典型的网状结构，网状结构共聚物具有一定的可压缩性。

往复泵 reciprocating pump 靠活塞的往复运动输送液体的高压泵。活塞柱的一端与偏心轮相连，偏心轮连在电动机上，电动机带动偏心轮转动时，活塞柱则随之左右移动，完成吸液和排液操作。主要有单活塞和双活塞往复泵。

往复式隔膜泵 reciprocating diaphragm pump 依靠活塞的往复运动带动隔膜驱动液体的高压输液泵。活塞柱与油接触，当活塞柱作往复运动时，隔膜受到油压的作用，对流动相部分产生“吸引”或“推压”，使单向阀吸液或排液，从而获得稳定的液流。

微波萃取分离法 microwave extraction separation 一种利用微波能强化溶剂萃取，使固体或半固体试样中的某些有机物成分与基体有效地分离，并能保持分析对象的原本化合物状态的分离、富集方法。微波萃取分离法包括试样粉碎、与溶剂混合、微波辐射及分离萃取液等步骤，萃取过程一般在特定的密闭容器中进行。由于微波能是通过物质内部均匀加热，热效率高，萃取效率高；可实现时间、温度、压力的控制，故能使萃取分离过程中有机物不会分解，有利于萃取热不稳定的物质。微波萃取分离法已广泛用于土壤中多环芳烃、杀虫剂、除草剂等污染物；食物中的有机成分；植物中的某些生物活性物质；天然产物中有效成分的提取。

微波辅助萃取 microwave-assisted

extraction; MAE 在分析化学中微波最初用于微波消解试样。1986年,K. Ganzler 等首次报道了应用微波萃取作为色谱用样品的制备方法,并应用于土壤中的污染物的测定。微波辅助萃取可在高于溶剂正常沸点下进行,微波辅助萃取已作为美国环保局的标准分析方法。

微波功率 microwave power 表示了微波的强弱。在测量 ESR 谱时需使用适当的微波功率。若微波功率过大,会导致 ESR 信号的畸变和变弱;微波功率太小,则信号也太弱,不利于提高信噪比。由于自由基容易发生饱和现象,所以在测试时一般采用 1mW 或更小的微波功率;而对于金属化合物,由于不易发生饱和,可使用 5mW 或更高的微波功率。当微波功率超过 0.1mW,且没有发生饱和时,从反射式腔 ESR 谱仪的晶体检波器的输出信号电压将正比于入射到样品腔上微波功率的开方。

微波频率 microwave frequency ESR 谱仪一般为定频扫场型,即固定频率扫描磁场。常用的 X 波段 ESR 谱仪的微波频率大约为 9～10GHz。根据不同的谐振腔,腔内样品的状态、量及放置位置等的不同,微波频率会有所不同。测试时需首先寻找共振频率,然后在此固定微波频率下进行 ESR 谱测量。在多数的 ESR 谱仪中,微波频率是个可变参数,不过它的变化很小,主要原因是,微波频率变化范围一般不允许超过速调管中心频率的 ±10%。

微波桥 microwave bridge ESR 谱仪中的微波系统,包括微波的产生(速调管)、传输(波导、参考臂、环行器或双 T)、检波(晶体检波器)等微波电路。

微波消化法 microwave digestion 在微波炉中,利用微波能分解固体试样的方法。将称量后的固体试样(如头发样)放入微波消解罐(聚四氟乙烯制并耐一定压力)中,加入一定的消解试剂(如氧化性酸等),密封后放入微波炉中,控制一定条件,使试样消解完全。由于微波能是由内部均匀加热,热效率高,试样消解完全,又能实现时间、温度、压力的控制,因此具有快速、节能、节省试剂、保护环境等优点。

微波诱导等离子体 microwave induced plasma 通过微波频率为 2450MHz 的电磁场与工作气体(He 或 Ar)的作用而产生的高温等离子体。它具有作为原子发射激发光源的重要性质。

微波诱导等离子体原子发射光谱检测器 microwave induced plasma atomic emission spectrometer detector; MIP-AED 是原子等离子体元素选择检测器之一,商品仪器简称 AED。它的特点是能够同时选择检测多种元素,具有高灵敏度、高选择性和线性范围宽的优点。其工作原理是:从气相色谱分离出来的组分进入石英放电管,样品在高能等离子体吸收能量产生化学键断裂,并使其原子激发到较高的电子激发态,当激发态的原子和

离子失活转变到较低能级时可给出特征的原子发射光谱，经光栅分光，用光电倍增管或光电二极管阵列器接受信号，其信号在理论上应与元素量成正比，因此可以用于计算化合物的经验式，为组分定性提供参考。

微波诱导等离子体原子吸收光谱法 microwave induced plasma atomic absorption spectrometry; MIP-AAS 一种利用微波诱导等离子体作为原子化器的原子吸收光谱分析技术。微波诱导等离子体是一种无电极放电，无电极污染，可在几十至几百瓦的低功率和在每分钟几十至几百毫升的低气体流速下工作。它的缺点是样品承受力低，基体效应严重。用 MIP-AAS 测试样品时，用微量注射器将几微升样品加到钽丝上，先用小电流加热干燥样品，再增大电流加热使样品蒸发。氩气将样品蒸气载入微波等离子体，原子化后再进入原子吸收池，测量吸光度，根据吸光度大小确定被测元素的含量。

微电喷雾 nanoelectrospray 又称为纳升级电喷雾。是质谱分析中的一种微量化的电喷雾进样法。在微电喷雾法中，样品溶液经内径约 1μm 的毛细管，以 20～40nl·min^{-1} 的流速流出，生成直径在 200nm 以下的微小液滴。此方法原则上可达到在一个液滴中只有一个样品分子，从而提高了离子化效率，而且可以抑制多余的溶液进入离子源，减少真空系统内的污染，可提高信噪比。

微分差热分析 derivative differential thermal analyisi; DDTA 由差热曲线的一级微分所测定的$\frac{d(\Delta T)}{dt}$-$T(t)$图（DDTA 图）。它不仅可精确提供相变温度和反应温度，而且可使原来变化不显著的差热曲线变得更明显，因为 DDTA 曲线可清楚地把分辨率低和重叠的峰分辨开。

微分谱 differential spectroscopy 在俄歇谱图中，以俄歇电子能量 E 为横坐标，以能谱密度的变化率 dN（E）/dE 为纵坐标的俄歇电子能量分布图。微分谱可以排除干扰，较好的识别俄歇峰，在实际分析中被广泛应用。由于俄歇电子的信号很弱，而次级电子的背景信号很强，在积分谱中俄歇电子峰基本被本底信号所掩盖。通过对积分谱微分可以把尖锐的俄歇信号放大而使平坦的背景信号变成直线。

微分型检测器 differential detector 与积分型检测器不同，微分型检测器显示的是某一物理量随时间瞬时变化的结果，例如电离室中的离子流随时间的变化或热导池中气体热导率随时间的变化等。因此，所得的色谱图为一峰型曲线。绝大多数常用的检测器都属于微分型。根据响应特性，微分型检测器又可分为浓度型和质量型两类。参见**积分型检测器**条。

微火焰原子吸收光谱法 microamount flame atomic absorption spectroscopy 一种联合使用高性能空心阴极灯、脉冲雾化微量进样、石英管捕集技术、流动注射在线富集和氢化物发

生等几种改善火焰原子吸收光谱分析性能的分析技术。测定金、铅和砷的信噪比分别提高了 950、67 和 430 倍。

微孔薄膜过滤浓集法 Millipore membrance filtration concentration method 一种用孔径 3μm 或 5μm 的微孔薄膜，通过过滤技术分离和浓集血中微丝蚴的方法，用于诊断丝虫病。效果优于其他诊断方法。

微孔法 micropore method 一种 FTIR 微区测量技术，它主要用于局部微小区的测量，如透明薄膜上的污斑，油漆碎片、纤维样品的检测等。利用微孔遮挡大部分光束，进行微小区域的测量。微孔挡板通常有孔径 φ2mm、φ1mm、φ0.5mm 等数种，最小可到 φ50μm。测量时光通量取决于挡板的孔径面积。如 φ300μm 微孔光通量仅相当光能量的 1%。使用微孔挡板时，最好与红外聚光器配合，以便增加光通量。微孔法实用性较强，但因样品区域太小，操作不方便，故近年来微区测量都采用红外显微镜。

微孔树脂 micro-reticular resin 整个网状结构中均充满了微细孔道的树脂。其微孔是在树脂处于溶胀状态下形成的，孔的大小由树脂的交联度确定，交联度大于 8% 的树脂的孔径小于 5nm。微孔树脂的交换容量较高，阴离子型树脂的交换容量在 3 ~ 4mmol · g^{-1}，阳离子型树脂的交换容量在 4 ~ 5mmol · g^{-1}。微孔型树脂广泛用于小分子的分离，在离子色谱中可用作抑制柱的填料。低交联度的微孔型树脂能吸附有机大分子，被用于糖、多肽、核苷酸的分离。

微库仑检测器 micro-coulometric detector 又称电量检测器。含硫、氮、卤素等化合物经催化加氢，分别转变为 H_2S、NH_3 及卤化氢等，然后使之通过库仑池，此时，H_2S、NH_3 及卤化氢被库仑池吸收，与其中的溶液发生反应，使库仑池失去平衡，于是库仑池就通过电解特定物质来恢复这种平衡，电解中所耗电量与被测组分的摩尔数成比例。主要用于检测含硫、氮、卤素等化合物。

微量化学法 microchemical method 一种有别于传统样品制备实验方法 (classical macrochemical method) 的样品处理技术，它可视为对化工生产过程、化学实验过程的微缩，即是将工作的对象、物料逐项地缩减，使得操作过程小型化、微型化，使用的主要配套设备有离心机、粉碎机、旋涡混匀器等。与传统样品制备实验方法比较，具有快速、方便、高效、分析成本低和对环境污染小的优点。在检验检疫系统已广泛应用于农、兽药残留量、食品添加剂等检验实践。

微量进样(法) microsample-injection 每次只往原子化器内注入很小的试样量。它对进样量的大小并没有严格的定义，通常是 20 ~ 100μl。其进样方式很多，如微量杯进样法，脉冲进样法、金属丝圈进样法（不用雾化器），流动注射进样法等。其特

点是用样量少，特别适用于贵重或来源稀少的生物、考古等的样品分析；减少了高含盐量样品对喷雾系统的堵塞现象，适于高黏度如血清样品；测定精度好；分析速度快。

微量进样针 micro-syringe 又称微量注射器。在色谱分析的手动进样操作中，用来吸取样品溶液并将其注入色谱仪的专用注射器。对于阀进样器，所用注射器的针头为平头，注射器中的样品溶液先注入阀中的样品环中，然后通过进样阀将样品导入色谱柱；而在隔膜进样法中，注射器的针头为与医用注射器针头类似的尖头，针头穿过隔膜直接将样品溶液注入色谱柱入口处。常用微量注射器的体积在 1～50μl。

微量色谱法 micro-chromatography 采用微型色谱柱和高灵敏检测器的色谱体系。为了与微型柱相匹配，要求色谱仪的各功能部件也相应小型化和微型化。微量色谱法的优点是适合于样品量很少的样品分析，使用的流动相溶剂少。

微膜抑制器 micro-membrane suppressor 结合了抑制柱的高容量和中空纤维抑制器的小死体积等优点的一种新型离子色谱抑制器。

微区 X 射线分析 X-ray microanalysis 利用从物质中所激发出的特征 X 射线来进行材料微区分析的技术叫微区 X 射线分析。它本身又分为 X 射线波谱分析法、X 射线能谱分析法、X 射线荧光分析法三种。

微区分析 microanalysis 在物质的微小区域中进行元素鉴定、组成分析和形貌分析。被分析的体积通常小于 $1\mu m^3$，相应被分析物质的质量为 $10^{-12}g$ 量级。为了实现微区分析，通常采用一定能量的初级微粒子束，如电子、离子等作为微探针去激发固体，从而获得有关被分析微区的元素组成、分子组成以及原子价态等信息。

微扰作用 perturbation 规定一般体系运动的方程式中出现的函数或算符是比较简单的已知部分加上很小的附加项时，将此附加项看做前者规定运动的很小的校正，称为微扰。一般指哈密顿算符的附加项。在磷光分析中，重原子效应的产生便是由于重原子的高核电荷增强了溶质分子的自旋-轨道耦合作用，增大了从第一激发单线态向三线态跃迁的几率之故，重原子的这种作用也称为微扰作用。

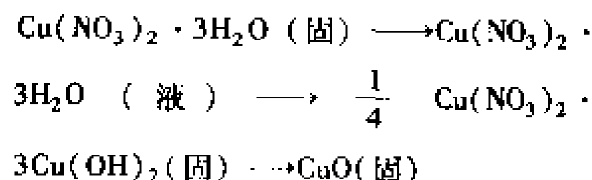
微乳液电动色谱 microemulsion electrokinetic chromatography 在胶束电动色谱中，分离载体是由表面活性组成的离子胶束。若以水包油微乳液作为分离载体，则称为微乳液电动色谱。微乳液由水、不溶于水的有机液体、表面活性剂和共表面活性剂组成，其中水相为缓冲液，油相为烷烃组成。表面活性剂与胶束电动色谱中应用的表面活性剂相同，共表面活性剂由中等长度脂肪醇组成。

微乳状液 microemulsion 一种介于乳状液和胶体之间的一种分散体系，由水、非极性溶剂、表面活性剂和助表面活性剂（一般是含 4 个到 6

个碳的烷基醇）按一定的比例配制而成。微乳状液透明，微粒直径大约为10~20nm，肉眼看不见光的散射，且很稳定，离心不分层，耐稀释作用。微乳状液对非极性的难物质，如多环芳烃有很好的增溶作用，故常用作分析测定这些物质的增溶、增稳、增敏介质。

微商热重法 derivative thermogravimetry; DTG 热重曲线对温度或时间的一阶微商，该法测定的是失重速率。新型热重分析仪都有质量微商单元，通过质量微商线路可直接记录微商热重曲线。可根据其峰面积计算出失重。

微商热重曲线 derivative thermogravimetrie curve 由微商热重法记录的曲线，称为DTG曲线，曲线的纵坐标为质量变化率，横坐标为温度或时间。由于DTG曲线呈峰形而与DTA曲线相类似，因此可在相同的温度范围内对它们进行对比分析而获得有价值的资料。例如关于 $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ 的热分解机理，通过DTA曲线和DTG曲线的对比，在DTA曲线上有三个吸热峰，而DTG曲线上只显示出第二、三吸热峰伴有失重，再根据DTG曲线计算出失重的量。可推断 $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ 的热分解机理为



$Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$（固）$\longrightarrow Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$（液）$\longrightarrow \frac{1}{4}Cu(NO_3)_2 \cdot 3Cu(OH)_2$（固）$\longrightarrow CuO$（固）

微生物测定法 microbilogical assay 用于测定体液中抗菌药物浓度的一种经济简便的经典方法。分为比浊法、试管稀释法、琼脂扩散法。前二者因准确性较差，已很少使用，目前常采用琼脂扩散法。其基本原理是抗菌药物在接种有试验菌的琼脂中扩散，对其产生抑菌圈。在一定浓度范围内，抑菌圈直径与抗菌药物浓度的对数呈直线关系。根据同一平板内标准溶液的抑菌圈大小，可直接用回归方程求出被测样品的浓度。按加样方法的不同，琼脂扩散法又可分为管碟法、打孔法和纸片法。本法除用于抗菌药物外，历史上还用于维生素和氨基酸等的测定。

微生物传感器 microbial sensor 由包含微生物的固定膜结合一定的转换器而组合成的传感器。主要基于两种测定指标，即以微生物呼吸活性为指标的耗氧型传感器和以微生物的代谢产物为指标的代谢型传感器。

微生物电极传感器 microbe electrode sensor 将微生物（常用的主要是细菌和酵母菌）作为敏感材料固定在电极表面构成的电化学生物传感器。其工作原理大致可分为三种类型：（1）利用微生物体内含有的酶（单一酶或复合酶）来识别分子；（2）利用微生物对有机物的同化作用，通过检测其呼吸活性（摄氧量）的提高，即通过氧电极测量体系中氧的减少间接测定有机物的浓度；（3）通过测定电极敏感的代谢产物间接测定一些能被厌氧微生物所同化的有机物。微生物电极传感器在发酵工业、

食品检验、医疗卫生等领域都有应用。例如：在食品发酵过程中测定葡萄糖的荧光假单胞菌电极；测定甲烷的鞭毛甲基单胞菌电极；测定抗生素头胞菌素的 Citrobacter freudii 菌电极等等。

微生物燃料电池 microbe fuel cell 利用微生物反应使燃料的化学能在电极反应中被利用的有机燃料电池，具有转化效率高的特征。

微生物显影 bioautography 在纸色谱或薄层色谱中利用抗菌活性来确定抗菌物质的色谱位置的一种技术。微生物显影的方法首先是将接过种，有对被测抗菌素起作用的细菌的琼脂培养基制成平板型，然后再将欲检测的色谱图放在上述的琼脂平面上，经培养一段时间后，有抗菌素的部位即呈现出清晰的抑菌圈，以此来确定抗菌素在色谱图上的位置。

微填充柱 micro-packed column 将小颗粒的填料直接填充到内径 1mm 或 1mm 以下的管内的填充柱。要求微填充柱中的填料保持在很窄的筛分范围内（3～5μm 之间），以使填充均匀性良好，即使采用较短的色谱柱也能获得很高的柱效。由于微填充柱对样品的负荷量较小，因而需要匹配较高灵敏度的检测器。

微通道板检测器 microchannel plate detector 20 世纪 70 年代发展起来的新型质谱仪检测器。由高铅玻璃制成的，具有较高二次电子发射率的许多微型通道管（直径约 20μm，长约 1mm）组成。每一个通道相当于一个管状电子倍增器，是一种多点检测器，作为质谱的检测器，它可同时检测相同质荷比的所有离子，有别于阵列式检测器同时检测不同质荷比离子的工作方式。该检测器的一个突出优点是可以同时检测不同质荷比的离子。

微吸附检测器 micro-adsorption detector 又称质量检测器。它的工作原理为：在一小圆筒的壁上附着吸附剂，此圆筒与自动微量天平的一臂相连。当色谱柱后的流出物流过此圆筒时，载气中的被测组分被吸附剂所吸附，从而使圆筒的质量增加，使天平失去平衡，此时自动天平的电磁砝码会自动补偿，其所耗电量与被吸附组分的质量成比例，可自动记录下来。

微型柱 micro-column 内径在 1mm 左右的填充型色谱柱。通常用于高灵敏的微量成分分离。

微衍射 micro diffraction 对样品某个较小的微区进行衍射来获得该微区晶体学信息的分析手段。为了获得比选区电子衍射更小的选区，采用微衍射技术（μ 衍射）。实验时用扫描透射操作方式，束斑直径减少到 100nm 以下，样品上参与衍射的微区范围由束斑直径来决定。

微柱高效液相色谱法 micro-high performance liquid chromatography 又叫一滴液相色谱法。微柱是指内径为 0.1～0.5mm 的填充色谱柱。微柱高效液相色谱法是液相色谱法新近发展的理想类型。根据柱内压及实际需要

选择内径为 0.1 ~ 0.5mm、柱长为 10 ~ 200cm 的色谱柱。柱管材料为熔融石英管或聚四氟乙烯管，柱填料粒径为 1 ~ 5μm，流动相流速为 1 ~ 10μl · min^{-1}。该法适用于石油化工产品、生物样品、食品、药物及临床分析等许多领域。特点是色谱柱渗透性好，柱效高，流动相最佳流速低和消耗最少，分析速度快，灵敏度高，可采用多种检测器等。

维生素测定 determination of vitamin 维生素的种类很多，它们在化学结构上没有共性，有的属于胺类（如 VB_1），有的属于醛类（如 VB_6）、有的属于醇类（如 VA），还有的属于酚或醌类化合物等。根据维生素的物理性状，如溶解性可以分为脂溶性（如维生素 A、D 、E 和 K 等）和水溶性（如维生素 B_1、B_2 和 C 等）两大类。检验维生素的方法很多，有微生物方法、化学法、仪器法（紫外分光光度法、薄层层析法、液相色谱法、气相色谱法和荧光分光光度法）、生物鉴定法等，多种维生素的含量测定目前主要用高效液相色谱法。

维生素 A 测定 determination of vitamin A content 先将样品中的脂肪抽提出来进行皂化，用乙醚萃取其不皂化部分，再经中性氧化铝柱层析或淋洗除去干扰物质，用紫外分光光度法在 328nm 处进行测定。或者基于 Carr-Price 反应，即在氯仿溶液中维生素 A 与 $SbCl_3$ 呈现蓝色的反应，在 620nm 进行比色测定。维生素 A 也可用高效液相色谱法测定。

维生素 B_1 测定 determination of vitamin B_1 样品用 HCl 酸解或淀粉酶、木瓜蛋白酶酶解后，使结合型维生素分解为游离型，可抽出全部维生素 B_1 用人造沸石柱或硅镁吸附剂除去杂质，提纯维生素 B_1 待用。维生素 B_1（盐酸硫胺素）含量通常采用荧光分析法测定，即在碱性溶液中用赤血盐（铁氰化钾）将其氧化为发蓝色荧光的硫胺荧后测定，波长激发 365nm，发射波长 435nm。其他方法还有比色法（重氮化对氨基苯乙酮法）、液相色谱法（可同时测定维生素 B_1、B_2）。

维生素 B_2 测定 determination of vitamin B_2 维生素 B_2 即核黄素，其测定方法有荧光法、分光光度法、比色法、高效液相色谱法等，另外还有生物测定法。液相色谱法和核黄素荧光分光光度法是目前比较常用的方法。核黄素荧光分光光度法测定原理如下：样品经酸解、酶解处理后，游离的核黄素用高锰酸钾或过氧化氢氧化色素和杂质，用硅镁吸附剂柱层析提纯核黄素后，再用荧光法测定其含量，激发波长 440nm，发射波长 525nm。

维生素 B_{12} vitamin B_{12} B_{12} 是一个复杂的类咕啉（复合吡咯环）化合物，它的中心部位由 4 个还原的、被取代的吡咯环组成，4 个吡咯环包围着 1 个钴原子。因为氰化物占据了钴原子同等位置，所以把 B_{12} 又称为氰钴胺素（简称 B_{12}）。它分为羟基

钴胺素、甲基钴胺素和5-脱氧腺苷钴胺素三种形式。后两种钴胺素在甲基丙二酰辅酶 A 转化成琥珀酰辅酶 A 的反应中和高半胱氨酸甲基化生成蛋氨酸的反应中起特殊的辅酶作用。三种钴胺素均存在于血浆中并与蛋白结合。甲基钴胺素是血浆 B_{12} 中的主要形式。

维生素 C 测定 determination of vitamin C 维生素 C 也称抗坏血酸，维生素 C 在食品中有抗坏血酸、脱氢抗坏血酸、2,3-二酮古乐糖酸三种形态，常测定抗坏血酸和脱氢抗坏血酸两种主要成分的总含量来代表维生素 C 的量。维生素 C 含量测定的最主要方法有靛酚滴定法、苯肼比色法、极谱法、荧光分光光度法、液相色谱法等。靛酚滴定法只测定还原态的抗坏血酸，苯肼比色法测定抗坏血酸、脱氢抗坏血酸和2,3-二酮古乐糖酸的总量，荧光法只测定抗坏血酸、脱氢抗坏血酸的总量。

维生素 D 测定 determination of vitamin D 具有维生素 D 活性的化合物约有十种，比较重要的有维生素 D_2、维生素 D_3 及维生素 D 原。维生素 D 的提取方法是用索氏抽提器将脂肪从样品中抽出，皂化后用乙醚抽出不皂化物，然后用毛地黄皂苷除去硬脂酸甘油酯。使其能过酸性白土柱，用体积比 =1: 9 的乙醚-石油醚溶液洗脱杂质，收集用体积比 =3: 7 的乙醚-石油醚溶液洗脱的馏分，将该馏分减压浓缩后再进行分析。维生素 D 的测定方法有三氯化锑比色法、紫外分光法、薄层层析法、气相色谱法、液相色谱法，其中三氯化锑比色法、液相色谱法是 AOAC 方法。三氯化锑比色法是利用维生素 D（氯仿溶液）与 $SbCl_3$ 反应出现黄色，在 500nm 波长下用比色法测定。

维生素 E 测定 determination of vitamin E 维生素 E 又称生育酚，常见有 α、β、γ、δ 生育酚和 α、β、γ、δ 三烯生育酚。从样品中抽出脂质，加联苯三酚，在氮气保护下进行皂化，乙醚萃取不皂化物，可用如中性氧化铝柱层析或薄层层析等方法，尽可能地除去杂质后，供分析用。维生素 E 的测定化学方法有铁离子-α,α'-联吡啶法，利用 Fe^{3+} 离子与维生素 E 反应生成 Fe^{2+}，加联吡啶形成桃红色溶液，在 520nm 下可用比色法测定。如果用 4,7-二苯基-1,10-菲啰啉显色，则在 534nm 比色。常用的仪器分析方法有气相色谱法、液相色谱法和荧光分光光度法等，尤其是液相色谱法已成为一种常规分析方法。

伪回波变换滤波 pseudo-echo transformation filter 因为通常无法预测共振峰的线形是纯吸收形还是其他线形，用绝对值方式表示二维谱，可避免繁琐的调相。绝对值线形沿着二维轴向有伸展很宽的尾部，因此以特定的方法滤波，如经指数衰减函数，然后在时域信号的中点经指数递增函数或高斯函数乘以自由感应衰减（FID）信号，便产生一个对称于此中点的类似于回波的伪回波。

尾吹气 make-up gas 在毛细管色

分析中，在毛细管柱的出口端引入的一路气流。其作用是减少柱后的死体积，改善柱效，满足检测器的最佳气体流速，以提高检测器的灵敏度。尾吹气可采用 N_2、H_2、He、空气等，其流速需根据检测器的灵敏度而设定，应与检测器相适应。

卫星峰 satellites 属于异核的耦合峰，对称地出现在观测核主峰的左右两侧，其间距为它们的耦合常数，强度是主峰峰强度乘以耦合核 $\left(I=\frac{1}{2}\text{者}\right)$ 的同位素丰度的一半。卫星峰的间距不随样品旋转而变化，其强度与主峰强度之比也是固定的，可以与旋转边带区分开来。常利用主峰在卫星峰高度处的峰宽来判断 NMR 谱仪线形的好坏。

位错 dislocation 晶体内部的一种线缺陷（一维缺陷）。基本类型有刃位错和螺位错两种。位错是因为应力超过弹性限度而发生范性形变产生的。从晶体内部看，它就是晶体的一部分相对于另一部分发生永久性的滑移，以致在滑移区的边界线发生的线状缺陷。位错是决定金属力学性质的一个重要因素，也是范性形变理论的基础，对固体的其他许多性质，也起着显著的作用。

位移试剂 shift reagent 当少量加到被测试样的溶液中，能使被测试样分子中各种化学基团的化学位移有不同程度移动的试剂。它们主要是稀土金属的配合物，通式为 $Ln(R_1—CO—CH=CO—R_2)_3$，Ln 是氧化数为 +3的稀土金属离子。当 $R_1=R_2=t$-Bu（叔丁基）时配体缩称为 DPM；当 $R_1=t$-Bu，而 $R_2=CF_3(CF_2)_2$—时为 FOD；当 $R_1=R_2=CF_3(CH_2)_2$—时为 TFN；当 $R_1=R_2=CF_3CF_2$—时为 FHD。最常用的是 $Pr(DPM)_3$ 与 $Eu(DPM)_3$。为减小叔丁基的干扰通常用全氘代的试剂。Eu^{3+} 位移试剂导致谱线向低场移动，Pr^{3+} 位移试剂使谱线向高场移动。由于稀土离子是顺磁性离子，它们的未成对电子密度转移到被测核上产生了接触相互作用，以及电子的磁各向异性将以离它距离 $\frac{1}{r^3}$ 成正比地影响核的化学位移。应用位移试剂可简化谱图解析，试样的 δ 变化量的大小与位移试剂浓度成正比，但高达某一值后，δ 不再增减。

位置灵敏检测器 position sensitivity detector；PSD 是近代谱仪发展起来的新技术之一，是一种高效的信号探测器，它可用于小面积 XPS 或四极透镜系统。其工作原理如下：PSD 是以脉冲计数采集数据的，电子或离子首先与一对微通道板发生碰撞，在微通道板中电子或离子被放大后产生出放电脉冲，该脉冲撞击电阻阳极后，产生的信号被前置放大器放大后送到多通道分析器中，由计算机进行整理。PSD 在采集信号强度上具有明显的优势。

味觉传感器 taste sensor 基于生物细胞中的味觉物质（如苦味、咸味和酸味等）与生物膜中的类脂双层间的非特异相互作用而导致膜电位

的自激荡现象而制成的传感器。

魏森堡照相法 Weissenberg photography 记录和测定晶体衍射效应的照相方法。实验装置由提供特征X射线的光源、可沿垂直于X射线束的轴旋转的样品台、只让某一层衍射通过，而挡住其余各层衍射的筒形层线屏以及垂直于X射线束的筒形X射线感光板所组成。首先用回摆法将倒易点阵面调节到垂直于样品旋转轴，移动层线屏，选定需要曝光的倒易点阵面，在曝光过程中，晶体摆动的同时，同轴的筒形感光板同步摆动并沿轴向慢慢地作往复运动，使回摆图中同一层线上的衍射点有规则地展开在一个平面上。这样，衍射点不易重合，易于指标化及测量衍射强度。

温度猝灭 temperature quenching 荧光物质的荧光强度一般随温度升高而降低的现象。高温下，由于分子碰撞产生的非辐射失活的几率增大，一般荧光物质的量子产率及荧光强度降低。利用温度猝灭的原理，可以在液氮等较低温度下分析常温下不发光的物质，利用不同物质对温度的敏感性不同还可以进行混合物组分的选择性分析。

温度滴定 thermometric titrimetry 基于反应进行所产生的反应热引起的温度变化来确定滴定终点的分析方法。可以用于用指示剂等确定终点有困难的各种（中和、氧化还原、沉淀和配位）滴定中。方法是：将试样溶液放入滴定用杜瓦瓶中放置到温度平衡后，把已恒温好的滴定液由活塞式滴定管逐渐加入并充分搅拌，记温度（或温度引起的某些参数如热敏电阻的电阻的变化）和滴定液体积的关系，由所谓温度滴定曲线确定终点滴定。

温度滴定法 thermometric titration 一种利用滴定过程中的温度变化确定终点的容量分析法。该法将标准溶液滴加到试样溶液中，连续记录溶液的温度（或温度引起的某些参数如热敏电阻的电阻的变化）与滴加的标准溶液体积关系。所得到的关系曲线称为温度滴定曲线，纵坐标为温度，横坐标是标准溶液的体积或匀速滴定过程的时间。从滴定曲线可确定反应的起点和终点。该法可用于用指示剂确定终点有困难的各种（中和、氧化还原、沉淀和配位）滴定中。

温度因子 temperature factor 描述原子热运动对衍射强度影响的校正因子。在推算原子散射因子时，假定原子是处于静态的，但实际上原子不断地在平衡位置附近振动，温度不同，振动的幅度也不同。在实际工作中，将原子热运动对衍射强度的影响，归入原子散射因子 f 的计算中。

$$f=f_0\exp\left[-B\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2\right]$$

式中，f_0 为原子处于静止状态时的原子散射因子；$\exp\left[-B\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2\right]$是温度校正项，称为温度因子；$B$ 为各向同性热振动参数，$B=8\pi^2\bar{u}^2$；$\bar{u}^2$ 表示原子平均位置到点阵面的垂直距离的平方平均值；θ 为布拉格衍射角；λ

为 X 射线的波长。在实际工作中，也常用 $U=\bar{u}^2$ 作为各向同性热振动参数。

文丘里管 Venturi tube 文丘里管是意大利物理学家文丘里（G. B. Venturi）发明的测量流体压力的一种装置，流体入口管径较大而后管径收缩再后逐渐扩大，入口压力高流速低，在管径收缩段流速高压力低，形成压差，在管径扩大段、流体逐渐减速，减小了湍流的形成。商品仪器中常用的同心雾化器，由两层同心管组成，内层吸液毛细管位于外管喷嘴的中央，两者之间形成环形节流喷口（文丘里型喷嘴）。当速度达到和超过音速的载气气流由环形喷口喷出时，形成负压，空吸作用使试液沿毛细管上升，由内管上端口高速喷出，将试液分散形成细小的雾珠和气溶胶，并随比较平稳的气流输送到雾化室。

紊流火焰 turbulent flame 燃气和助燃气供给全消耗型燃烧器，并在燃烧器的喷口直接混合燃烧产生的火焰。由于试液直接喷入火焰中，使火焰受到扰乱，火焰稳定性差，雾化产生的气溶胶粒度分布范围宽，大粒度气溶胶多，蒸发脱溶消耗大量的热量，对火焰有强烈的冷却效应，蒸发试液留存的固体微粒对辐射产生散射，引起高的火焰背景噪声。火焰受到直接喷样与燃气助燃气混合的扰动，在火焰区内没有一个明显的高自由原子浓度区，吸收光程又短，分析灵敏度低。在火焰光度分析中还使用这种火焰。

稳定离子 stable ion 在离子源生成的离子，离开离子源后直至到达检测器不发生裂解的离子。通常，指寿命比 10^{-5}s 长的离子。

稳定同位素 stable isotope 不发生或极不易发生放射性衰变的同位素。1913 年汤姆森（J. J. Thomson）和阿斯顿（F. W. Aston）第一次发现了稳定同位素 ^{20}Ne 和 ^{22}Ne。现已知有 81 种元素有稳定同位素。在自然界，质子数 Z 的稳定范围是 1～83（没有 $Z=43$ 和 61 的稳定同位素），质量数 A 的稳定范围是 1～209（没有 $A=5$ 和 8 的稳定同位素），中子数 N 的稳定范围是 0～126（没有 $N=19$、21、35、39、45、61、71、89、115 和 123 的稳定同位素）。

稳定同位素示踪法 stable isotope-tracer method 利用稳定同位素或其化合物指示和追踪与其相应元素或化合物在生物体内、外动态变化规律的方法。优点是没有放射性危害和污染环境，可在生理条件下进行试验，广泛用于临床诊断，药理、毒理和药物代谢的研究。

稳定温度石墨炉平台技术 stabilized temperature plateau furnace; STPF 简称 STPF 技术。斯拉文（W. Slavin）提出的一种综合利用多种技术的石墨炉原子吸收光谱分析方法。其内容包括在高质量热解涂层石墨管和里沃夫平台上用快速升温进行原子化，用氩气做载气并在原子化阶段停止通气，基体改进剂稳定被测组

分，塞曼效应扣除背景，快速电子响应检测电路和峰面积法测量信号等。该技术用于复杂样品的分析，取得了很好的效果。

稳健线性回归法 robust linear regression 能消除或降低异常点（outlier）影响和直接对非正态分布数据进行解析的线性回归方法称作稳健线性回归法。在实际测定中，化学测量的误差不一定服从正态分布，同时在测量中也往往存在异常点，而许多用于化学数据解析的常规方法都是基于最小二乘估计基础上的，最小二乘法极易受异常点影响，是不稳健的，异常点的存在能引起分析结果很大的偏差。采用稳健线性回归法能克服上述缺点，降低异常点对校正模型的影响，拓宽了化学计量学多元校正的实际应用范围。目前在卡尔曼滤波、主成分分析等方面都有稳健化方面的研究。

稳态信号 steady-state signal 是“连续流动分析”（参见**连续流动分析**条）方法所采集的信号，是在进样量足够大的条件下得到的。信号由基线逐步升高，最后达到稳态水平（高原型信号），其信号的高度不再随进样量的增加而变化，此时的信号称为稳态信号。其峰高相对独立于系统的物理和化学动力学状态。

涡流扩散 eddy diffusion 在色谱过程中，指溶质分子在前进过程中形成的类似于“涡流”的紊乱流动。由于柱填充物的空隙不规则，当溶质随流动相流向色谱柱出口时，溶质和流动相受到填料颗粒的阻力，组分分子在填充柱中的流动方向不断改变，行进的路径不一，使其在柱中的停留时间不等而造成的扩散效应。它使色谱峰变宽，变宽程度与填充物的形状、大小和填充的不均匀性有关。涡流扩散项 $A=2\lambda d_p$，λ 和 d_p 两项需要协调。参见**范第姆特方程式**条。

沃玻尔阻抗 Warburg impedance 一个与频率有关的电阻和假电容的串联所形成的阻抗。

渥拉斯顿棱镜 wallaston prism 是用方解石晶体或石英晶体制成的偏振棱镜，是由前、后两个直角半棱镜沿三角形斜面胶合而成，前半棱镜的光轴平行于长直角边，后半棱镜的光轴垂直于长直角边（当然，这两光轴在空间也互相垂直）。自然光垂直射入前半棱镜时不发生双折射，但在胶合斜边面上折射成 o 光和 e 光进入后半棱镜，射出后半棱镜时在晶体-空气分界面上再次折射，使 o 光和 e 光愈加分开。所以使用渥拉斯顿棱镜可以从自然光获得向不同方向射出偏离相当大的两束偏离光（o 光和 e 光）。

污染的生物监测方法 biological monitoring method of pollution 利用生物监测大气和水体污染的方法。主要有：现场调查（即在现场调查生物的受害症状、敏感程度）、现场盆栽定点监测（适用于大气污染场合）、生物体内污染物含量分析（从而了解哪些生物适合何种污染物的富集）、筛选出特定指示生物（如利用

地衣、苔藓等）进行监测。

污染物的毒性试验 toxicity test of pollutant 考察污染物进入环境后对组成生态系统的生物种群和生物群落包括人群所产生的毒性效应。是在传统毒理学的基础上发展起来的。除采用常规的实验室毒性试验外，还要进行野外调查、田间试验和定点、定位研究，并建立合适的生态系统数学模式，确定污染物危害的剂量-反应关系。此外，也包括急性毒性试验，用动物实验确定受试动物半数死亡的毒物浓度，以 LC_{50} 表示，可为进行其他毒性试验的实验设计提供依据。

污染物的生物监测 biological monitoring of pollution 利用生物个体、种群或群落对环境污染或变化所产生的反应阐明环境污染状况，从生物学角度为环境质量的监测和评价提供依据。常用的生物监测手段有以下几个方面：

（1）大气污染的生物监测，主要有：①利用指示植物检测大气污染；②测定植物污染物的含量，估测大气污染状况；③观测植物的生理生化反应，对大气污染的长期效应作出判断；④观测植物的生长状况、年轮变化，估测大气污染现状与历史。

（2）水污染的生物监测，主要有：①利用指示生物进行环境监测；②利用水生生物群落结构变化检测水污染；③水污染的生物测试，通过生物生理机能变化来测试水质污染状况。生物监测只有与物理、化学检测结合起来，才能取得更好的效果。

污染物排放标准 standard for discharge of pollutants 国家为实现环境质量标准或环境目标，对人为污染源排入环境的污染物的浓度或数量所作出的限量规定。制订这种标准的目的是控制污染源的排放量。污染物排放标准按污染物形态分为：气态污染物排放标准，规定二氧化硫、氮氧化物、一氧化碳、硫化氢、氯、氟以及颗粒物等的容许排放流量；液态污染物排放标准，规定废水（废液）中所含的油类、需氧有机物、有毒金属化合物、放射性物质和病原体等的容许排放量；固态污染物排放标准，规定填埋、堆存和进入农田等处的固体废物中的有害物质的容许含量。此外，还有物理性污染物排放标准如噪声标准、光污染标准等。

无场区 field-free region; FFR 在扇形磁质谱仪中没有电场和磁场的区域。在离子源中生成的各种离子，经加速电压加速之后，在进入电场（或磁场）之前所飞过的区域称为第一无场区（first field-free region）。由电场和磁场构成的双聚焦质谱仪中，磁场和电场之间的无场区域，称为第二无场区（second field-free region）。

无尘操作区 dust-free operating space 按照美国联邦标准对洁净环境的空气质量要求，无尘操作区系指在该工作区内每立方米大气中粒径大于 0.5μm 的颗粒物应该小于 100 个，即为 100 级。由于要使整个实验室做到并保持超净较困难，且成本太高，故建立局部的无尘操作区很受重视。

这种无尘区有两种，较大的是用塑料板在实验室中隔出一角；较小的是用玻璃或塑料膜制成箱。它们的共同特点是在小范围进一步净化空气及设备，或充以超纯惰性气体。

无定形沉淀 amorphous precipitation 颗粒直径小于 0.02μm 的沉淀。参见**晶形沉淀**条。

无放射源电子俘获检测器 non-radioactive electron capture detector 一种不用放射源的电子俘获检测器。它以氦气作为载气进入放电电离室，电极在氦气中放电，使氦电离而产生低能自由电子和光子。由于极化极较放电负极电位高，可吸收一小部分自由电子进入俘获反应区，并在极化极与收集极之间产生一定的基流。当载气中的电负性组分进入时，即俘获自由电子而降低基流，给出信号。这种电子俘获检测器的优点是不使用放射源，温度可达 400℃，灵敏度与用放射源的电子俘获检测器相同。参见**电子俘获检测器**条。

无辐射跃迁 radiationless transition 处于最低激发态（S_1 或 T_1）的分子返回基态 S_0 时不伴随光辐射的跃迁过程。它包含内转换 IC 及系间窜跃 ISC 等失活过程。

无规卷曲 random coil 无规卷曲与 α-螺旋结构、β-折叠结构一起构成了天然蛋白质二级结构。无规卷曲是指没有一定规律性构象的那部分肽链结构。由于酶的功能部位常常处于这种构象区域里，所以受到人们的重视。无规卷曲在蛋白质二级结构中所占的份额，可以通过拉曼光谱法测定、计算而得。

无机材料吸附结合法 inorganic materials adsorbing combination 利用具有强烈吸附特性的无机材料如分子筛或氧化铝等作为载体，先将分子筛用聚乙烯醇调制后固定于电极表面，然后使生物功能物质吸附固定于分子筛膜内，以此构成生物传感器的方法。

无机共沉淀剂 inorganic coprecipitant 共沉淀法是利用在试料溶液中生成一种适当的沉淀（载体沉淀），使微量待测组分与之一起共沉淀，从而实现分离或富集的方法。常用的无机共沉淀剂有氢氧化物、硫化物、水合二氧化锰、硫酸盐、磷酸盐，单体砷、硒、碲及难溶卤化物等。如氢氧化铁，它的颗粒细小、表面积大、吸附力强，能在较宽的 pH 值范围内使用，对于许多阳离子都是极有用的捕集剂，它可载带 Ag、Al、Co、Cu、Mg、Mn 等很多元素的离子。

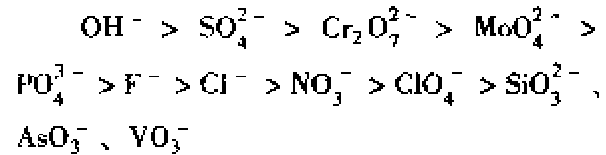
无机共价化合物萃取 extraction of inorganic covalent compound 一类液-液萃取的方法。某些无机化合物，如 I_2、Cl_2、Br_2、$GeCl_4$、AsI_3、SnI_4 和 OsO_4 等稳定的共价化合物，它们在水溶液中主要以分子形式存在，不带电荷。利用 CCl_4、CH_3Cl 和苯等惰性溶剂，可将它们从水溶液中萃取出来。

无机离子定性测定 inorganic ion qualitative detection 无机离子定性测

定是建立在固态的无机物由于离子间的相互作用而使光谱的谱带增宽，并使谱图复杂化的基础上的。通常多原子阴离子的吸收谱带很宽，它的频率会受阳离子的影响而变化。另外，无机离子的定性测定也建立在它们的水溶液光谱图由于离子间距增加，相互作用力减小而消除了阳离子的影响，使阴离子的特征变得明显，特征频率相对固定的基础上的。只要很好地控制被分析样品水溶液的 pH 值，凭借无机化合物的水溶液红外光谱，对一些常见的无机多原子离子能可得到正确而肯定的定性分析结果。

无机离子交换剂 inorganic ion exchanger 具有离子交换性质的无机物质。如氧化铝就可以用作离子交换色谱的固定相，是典型的无机离子交换剂。

无机阴离子交换剂 inorganic anion exchanger 无机阴离子交换剂有活性氧化铝、铝锌酸盐和钛铝酸盐等，但以活性氧化铝最有实用价值并早已商品化。活性氧化铝在溶液中具有无机阴离子交换剂的性质，阴离子在 Al_2O_3 柱上吸附能力，其次序由高到低为



$OH^- > SO_4^{2-} > Cr_2O_7^{2-} > MoO_4^{2-} > PO_4^{3-} > F^- > Cl^- > NO_3^- > ClO_4^- > SiO_3^{2-}$、$AsO_3^-$、$VO_3^-$

与常用的有机阴离子交换树脂相比，活性氧化铝最大特点是对 F^- 和 SO_4^{2-} 有很高的选择性，是目前国际上饮用水除氟最普通使用的方法，同时也是从各种复杂体系中分离 SO_4^{2-} 最实用的方法。

无机质谱法 inorganic mass spectrometry 用质谱仪器对无机化合物进行定性定量分析的方法。早期以火花源仪器为主，目前成功地把电感耦合等离子体（ICP）电离源与质谱结合起来，使质谱法更广泛的用于无机物的分析。无机质谱法的主要应用领域有：高纯气体中痕量杂质分析；无机物元素分析；固体表面的微区和深度分析等。无机质谱法的突出优点是它具有超高灵敏度。

无畸变的极化转移增强方法 distortionless enhancement by polarization transfer method；DEPT 一种利用极化转移技术区分 CH_n（$n=1\sim3$）基团的方法。它的脉冲序列如下

$$^{13}\text{C 观测核}\text{———————} 90°_x \text{————} 180°_y \text{————采集 FID}$$

$$^{1}\text{H 辐照核 } 90°_x - \frac{1}{2J_{CH}} - 180°_x - \frac{1}{2J_{CH}} - \theta_{\pm y} - \frac{1}{2J_{CH}} - \text{全去耦}$$

当对 ^1H 施加角度可变的 θ_y 脉冲的同时 ^{13}C 受到 $180°_x$ 的作用，此时 ^1H 核产生了极化并转移给与它耦合的 ^{13}C 核，使 ^{13}C 核信号增强。当取 θ_y 为 45°、90°和 135°时，经 $\frac{1}{2J}$ 时间间隔的演化，将分别接收到的是：CH_n 皆为正峰；只有 CH 正峰；CH、CH_3 为

正峰，CH_2 为负峰的 3 张谱图。对 3 张谱图进行比较和编辑，可以分别获得只出现 CH_3—、—CH_2—、>CH— 基团的谱图。此方法不能获得季碳的信息。它与不灵敏核的极化转移增强法（INEPT）比较，脉冲序列简短，容易操作，谱图相位不失真。

无极放电灯 electrodeless discharge lamp; EDL 用于原子吸收光谱分析的一种锐线光源。它是在长 3～8cm、直径约为 10mm 的石英管内，放入被测元素金属或卤化物，并充有几百帕压强的惰性气体。将放电管置于射频或微波高频电场中，借助于高频火花引发放电，随着放电的进行，管内温度升高，使金属蒸发或卤化物蒸发和解离，同时放电管内的惰性气体原子受到激发，被激发的惰性气体原子与被测元素的原子碰撞，使被测元素原子激发，发射特征的共振辐射。它有射频和微波激发两种方式，用 100Hz～100MHz 的射频激发，光源稳定性高，自吸很小；用大于 100MHz 的微波激发，输入光源的功率转为辐射的效率高输出强度大，使用寿命长。为了保证它工作的良好稳定性，要求放电管内的物质在 200～400℃ 具有百帕以上压强的蒸气压，这使许多元素的无极放电灯的制造受到了限制，目前制造的无极放电灯仅限于那些本身或其化合物具有较高蒸气压的元素，如砷、镉、锑、硒、锡、铊、锌等。

无胶筛分毛细管电泳 non-gel capillary electrophoresis 用低黏度的线性聚合物溶液代替高黏度交联的凝胶介质的毛细管电泳分离模式。常用的无胶筛分剂包括未交联的聚丙烯酰胺、甲基纤维素及其衍生物、聚乙二醇和葡聚糖等。

无孔单分散填料 non-porous monodisperse packing 表面和内部都无孔隙的实心球颗粒。为了适应生物大分子分离的需要，Unger 提出用1～3μm 粒径的无孔小球作固定相，大分子溶质在无孔小球之间的空隙中通过，并与小球表面相互作用，实现生物大分子的快速分离。无孔小球的基质有硅胶、树脂和金属氧化物（如二氧化锆）。

无脉动色谱泵 pulse-free chromatographic pump 在液相色谱中使用的不产生液流脉冲的高压输液泵。如双活塞往复泵就可以通过 2 个活塞的交替吸液和排液，使输出的液流几乎无脉冲波动，从而获得良好的分析重现性。

无偏估计值 unbiased estimator 用来估计待估参数真值是无偏的值。其统计含义是：在有限次测量时，由样本值求得的估计值在待估参数的真值附近波动，且其期望值就是待估参数的真值，用它来估计待估参数时没有系统误差。如算术平均值 $\bar{X}$ 是总体平均值 μ 的无偏估计值，样本方差 S^2 是总体方差 σ^2 的无偏估计值。

无铅汽油 unleaded gasoline 不含铅抗爆剂的汽油。当高压缩比的汽油

发动机使用低辛烷值的汽油时，发动机会产生爆震现象。通常在汽油中加入抗爆剂来提高汽油的辛烷值，以改善其抗爆性。过去常用四乙基铅作为汽油的抗爆剂，在汽油中加入 0.3% 以下的四乙基铅，能使辛烷值提高 15~20 个单位。但含四乙基铅的汽油在汽油缸中燃烧后，会出现金属铅和白色二氧化铅的沉积物，除破坏发动机的正常工作外，还产生废气严重污染大气。各国都已相继实行了限制含铅汽油的使用，而改用其他污染小或无污染的汽油抗爆剂。

无损检测 nondestructive examination; NDE 在不损坏被检测物的完整性及其使用价值的前提下检查和发现其存在的各种缺陷，或测定材料性能参数以评价其质量的一种非破坏性检测技术。广泛用于材料、设备、产品、核燃料元件等的质量检查，医学诊断，文物鉴定，地质勘探等各领域。

芴 fluorene 多环芳烃的一种，为可以发紫色荧光的无色片状结晶。熔点 116~117℃，沸点 293~295℃。存在于煤焦油中，通过二苯基甲烷制得。

物镜 object lens 电子显微镜中关键部件之一，是电子光学系统中获得具有一定分辨本领的放大电子像的电子透镜。它的质量优劣很大程度上决定了透射电镜分辨本领的好坏。

物理钝化法 physical deactivation 对载体进行钝化处理的一种方法，它是用化合物进行物理覆盖以达到钝化表面的目的，如载体表面镀银或涂敷聚四氟乙烯等。

物理干扰 physical interference 在溶液雾化进样时，由于黏度、密度、表面张力的改变导致溶液提升速度、雾化过程、气溶胶粒度分布和传输、溶剂蒸发和溶质挥发、自由原子的空间分布等变化而引起的干扰效应。在电感耦合等离子体（ICP）和火焰原子吸收光谱法（FAAS）中，这种干扰效应与观测高度有关。

物相形态分析 phase species analysis 物相形态分析是状态分析的一种，它有物理分析方法，如显微镜鉴定，X 射线物相和差热分析等；也有用化学分析手段进行化学物相形态分析，如湿法化学分析法，即用不同的溶剂处理试样，测定其中的成分，以确定物相形态。物相形态分析常用于金属腐蚀产物、氧化膜、锈层等的分析。

物质的量 quantity of substance 物质的量 n，是国际单位（SI）制中七个基本量之一，是从粒子数这一角度表示物质多少的一个物理量，即以阿伏伽德罗（Avogadro）常数为单位表示系统中存在多少基本单元（原子、分子、离子、电子、光子及其他粒子，或是这些粒子的特定组合）数目的一个物理量，单位是摩尔（mole，书写时常用 mol）。n_B 即表示单元 B 的物质的量，它与系统中单元 B 的数目 N_B 的关系为

$$n_B = \frac{N_B}{L}$$

式中，L 为 Avogadro 常数（数值上等于0.012kg 核素^{12}C 的原子数，其值为6.022045×10^{23}）。系统中 B 的物质的量 n_B 与其质量的 m_B（kg）的关系可表示为

$$n_B=\frac{m_B\times1000}{M}$$

式中，M 为 B 的摩尔质量（即以 g 为单位表示原子量或分子量等）。要注意，使用时“物质的量”这四个字不能拆开使用。

误差　error　测量值与真值之差。误差按其性质可以分为随机误差、系统误差和过失误差；按其产生的原因可以分为仪器误差、方法误差、试剂误差、操作误差和环境误差。测定值经过误差校正之后更接近于真值，但还不是真值，因为校正值本身也含有误差。随机误差影响测定结果的精密度，系统误差影响测定结果的准确度。

误差传递　error propagation　各直接测量值的测量误差向最后测量结果的传递转移的过程。在测定过程中，许多测定结果都是从多个直接测定量通过计算得到的，各直接测定量的测量误差最终都反映在测量结果中。若测量结果 y 是由多个独立直接测定量 x_1，$x_2\cdots$，x_n 得到的，$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，则最后测量结果的方差为

$$\sigma_y^2=\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)\sigma_{x1}^2+\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)\sigma_{x2}^2+\cdots+\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)\sigma_{x_n}^2$$

式中，$\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)$是 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$将其方差 σ_i^2 传递给 y 的误差传递系数；$\sigma_{x_i}^2$ 是测定 x_i 的方差。

雾化器　nebulizer　将试液分散为气溶胶的部件，是原子光谱分析的一种溶液进样装置。其功能是在动力的作用下，将试液雾化为细分散的气溶胶并引入原子化器。溶液雾化进样是等离子体原子光谱分析和火焰原子光谱分析的主要进样方式。常用的雾化进样装置有同心雾化器、错流雾化器、高盐雾化器等。同心雾化器结构简单，使用方便，但雾化效率低，仅为1%。错流雾化器和高盐雾化器的雾化效率高，可达 1.5% ~ 2%，适用于高含盐量溶液、用于悬浮液进样时雾化效率可提高到5%左右。对雾化器的基本要求是喷雾稳定、雾化效率高，形成的气溶胶粒子的粒径细，且粒径分布范围窄。

雾化室　nebulization chamber　又称预混合室。预混合型火焰原子化器的一个部件。它的内壁常做成锥形的，喷镀一层氯化聚醚塑料，便于未被利用的试液能顺畅地流入废液容器，在室内的喷雾器前端 2 ~ 3mm 处装有一个碰撞球或扰流器，或同时装有雾化球和扰流器。由雾化器出来的气溶胶撞击在雾化球和扰流器上，进一步细化为平均直径更小的气溶胶。它的功能是使由雾化器产生的粒度较大的气溶胶凝聚为更大的液珠沿室壁流入泄液管排走，同时使细粒度的气溶胶与燃气、助燃气在室内充分混匀，以减少其进入火焰时引起的火焰

扰动，使火焰燃烧更稳定，亦利于分析物在火焰内有效地原子化，减少和消除记忆效应。

雾化效率 efficiency of nebulization 以雾珠或气溶胶形式进入火焰或等离子体中试样量与吸喷试液的总量之比。雾化效率既依赖于雾化器的类型和结构，也依赖于被雾化试液的性质，如溶液的黏度、表面张力等。

雾翳 fog 感光板的乳剂层没有受光照作用的那部分，但在显影剂以及其他条件，如受力，受热等的作用下，仍能引起程度不大的变黑，这种没有光的作用而引起的乳剂还原产生的黑度称为雾翳。通常感光板越灵敏雾翳就越易产生，同时雾翳的产生也与感光板保存的时间和条件有关，时间越久，雾翳越大。

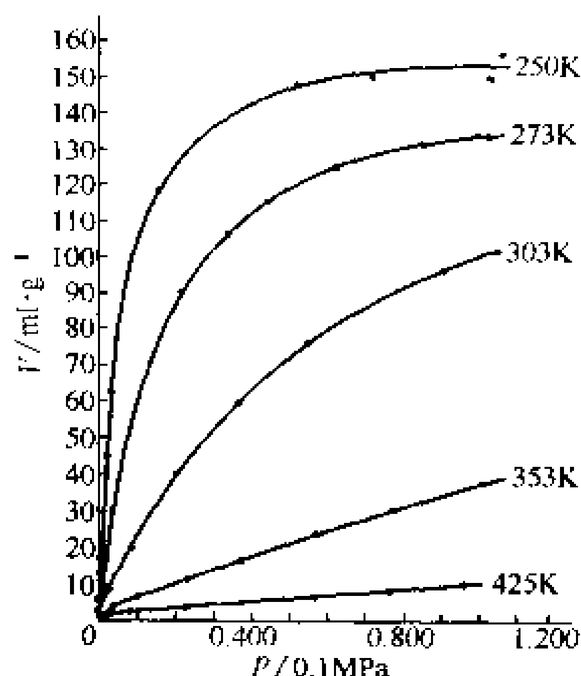
雾翳黑度 fog density 未曝光的乳剂经显影后产生的黑度，即乳剂特性曲线下部分与纵坐标交点处的黑度S_0。它不同于光谱的背景，雾翳黑度与感光板类型、存放条件和期限、显影时间和温度有关。雾翳黑度会在一定程度上覆盖强度较低的谱线，因而会影响微量元素的检出。所以应尽量采用雾翳黑度小的光谱干板，并尽量抑制雾翳黑度的增长。

X

吸附（溶出）伏安法 adsorptive stripping voltammetry；ADSV 是一种以吸附作为富集手段的溶出伏安分析法，即在一定的条件下，使被测物质以自发扩散或强制对流吸附在电极上，然后采取一定的扫描电压方式，将被测物质从电极溶出，根据所得的伏安曲线测定物质的浓度。已用于有机化合物、药物、生物物质及无机元素的测定。

吸附等温线 adsorption isotherm 在一定温度下，某一表面（或一定量的吸附剂）吸附气体的量与气体平衡压力的关系，或吸附液体的量与液体平衡浓度的关系曲线称为吸附等温线。吸附量的常用单位是每单位质量的吸附剂吸附气体（在 273.15K 和 1.01×10^5Pa 压力下）的体积或液体的量。下页图是不同温度下 NH_3 在活性炭上的吸附等温线。在吸附色谱中存在两种类型吸附等温线，一类是线性等温线，其分配系数是与溶质浓度无关的常数，能获得对称的色谱峰，溶质的保留时间不随浓度而变化。另一类是非线性等温线，分配系数随溶质浓度增大而变化。非线性吸附等温线又有两种形式，一种呈凸形，洗脱时呈现不对称的拖尾色谱峰，保留时间随样品量的增大而减小；另一种非线性等温线呈凹形，洗

出前伸色谱峰，随着样品量的增加，保留时间亦增加，减少样品量，有可能获得对称的色谱峰。



吸附电流 adsorption current 在任何个别的外加电位下，其大小取决于电活性物质或电活性物质的氧化或还原产物在指示或工作电极上吸附的速率或程度的法拉第电流。

吸附分离法 adsorption separation 固体表面受到的作用力是不饱和的，当其暴露在某一气体中时，气体分子将会附着在固体上，这种现象称之为吸附。吸附分离是借助于下述三种机理之一来实现的：位阻效应、动力学效应和平衡效应。实际吸附过程往往是物理吸附和化学吸附同时存在。气-固吸附在防毒、纯化气体、回收有用蒸汽和催化等方面有重要作用；液-固吸附应用在脱色、染色等方面。若固体是离子交换树脂，则可对溶液中的离子进行交换吸附，在分离、提纯电解质方面有广泛应用。碳多孔微球可能使氮的生产成本降低。同时开发出一种所谓超 A 型活性炭，它对多数气体的吸附容量约比工业活性炭高 2 ~6 倍。参见**碳多孔微球**条。

吸附共沉淀 adsorption coprecipitation 共沉淀现象中的一种。在沉淀过程中，构晶离子按一定的规律排列，在晶体内部处于电荷平衡状态，但在晶体表面的离子电荷则不平衡，从而会导致沉淀表面吸附杂质，并在沉淀表面上构成由表面吸附杂质离子形成的吸附层和溶液中带反电荷的抗衡离子形成的扩散层所组成的所谓吸附双电层。双电层能随沉淀一起沉降，从而玷污沉淀。这种由于沉淀的表面吸附所引起的杂质共沉淀现象，称为吸附共沉淀。吸附在沉淀表面第一层上的离子是具选择性的，通常是吸附过量存在的构晶离子。抗衡离子的吸附一般遵循如下规律：能与构晶离子形成溶解度愈小（或离解度愈小）的化合物的离子优先被吸附；离子的价态愈高，浓度愈大，愈易被吸附；沉淀颗粒愈小，表面积愈大，吸附的杂质愈多；温度升高，吸附量减少，因吸附作用是一放热过程。

吸附剂 adsorbing material 表面具有吸附活性部位的固体微粒。如硅胶和氧化铝微粒。吸附剂可以选择性地吸附不同类型有机化合物，在液相色谱中可用来作固定相。

吸附剂活性 adsorbent activity 指吸附剂吸附其他物质分子的能力。吸附剂表面的吸附位点越多，吸附活性

越强。

吸附平衡常数 adsorption equilibrium constant 指在一定的柱温下当达到平衡状态时，单位质量固定相中被吸附的组分量与单位体积流动相中该组分量的比值，以 u_s 或 K_s 表示。它是气-固色谱中的重要参数。如果两个组分或多个组分具有相同的吸附平衡常数，它们彼此不能分离，色谱峰完全重叠；两个或多个组分的吸附平衡常数相差越大，它们的色谱峰分离的就越好。

$$u_s=\frac{\text{每克固定相中被吸附组分的量}}{\text{每毫升流动相中组分的量}}$$

$$K_s=\frac{\text{每平方厘米吸附剂表面吸附组分的量}}{\text{每毫升流动相中组分的量}}$$

吸附溶剂强度参数 adsorption solvent strength parameter 在给定的吸附剂上，溶剂的相对极性大小。它能较好地量度吸附色谱体系的溶剂强度。

吸附色谱法 absorption chromatography 利用吸附性能不同实现各组分分离和分析的色谱方法。在色谱法中，以各种固体吸附剂为固定相，以气体或液体为流动相，样品混合物通过填于柱内或铺成薄层的固定相时，由于各组分与固定相之间吸附-脱附能力强弱的不同，其滞留程度就不同，也即各组分被流动相载带的速率不同，从而实现彼此的分离。

吸附型 PLOT 柱 adsorption type porous-layer open tubular column 该类型色谱柱中填充的是对永久性气体和低沸点化合物有较强保留的吸附剂固定相，主要用来分离易挥发的化合物。用于制备吸附型 PLOT 柱的吸附剂种类不多，主要分为无机吸附剂和有机吸附剂两大类。无机吸附剂包括氧化铝、分子筛（5A 和 13X），石墨化炭黑、碳分子筛和硅胶等；有机吸附剂包括多孔高聚物小球类和环糊精类等。对于永久性气体和易挥发性化合物的分离，吸附型 PLOT 柱是任何其他类型的柱子所不能替代的。

吸附指示剂 adsorption indicator 沉淀滴定银定量法中的法扬司（Fajans）法所使用的一类指示剂，属有机染料。当它被吸附在胶粒表面时，可能因形成某种化合物导致指示剂分子结构的变化而使其颜色发生变化。吸附指示剂分两类：一类为酸性染料，如荧光黄及其衍生物，能解离出指示剂阴离子；另一类为碱性染料，如甲基紫，罗丹明 6G 等，能解离出指示剂阳离子。以荧光黄（用 HFl 表示）作为 $AgNO_3$ 滴定 Cl^- 时的指示剂为例：在化学计量点前，溶液中 Cl^- 过量，AgCl 沉淀胶粒带负电，不吸附 HFl 离解出的阴离子 Fl，溶液呈 Fl 的黄绿色；当滴定到化学计量点时，稍过量的 $AgNO_3$ 即使 AgCl 沉淀胶粒带正电，强烈吸附 Fl，导致颜色发生明显变化，沉淀表面呈淡红色指示终点的到达。

吸附柱 adsorption column 以固体吸附剂作填料的色谱柱。是液固吸附色谱中典型的固定相，如硅胶柱和氧化铝柱。

吸光度 absorbance 入射辐射强

度 I_0 与透射辐射强度 I 之比的常用对数值。它是一个量纲为 1 的量，用符号 A 表示

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \lg \frac{1}{T}$$

在过去的文献中，曾称光密度 D(optical density)或消光 E(extinction)。吸光度具有加和性，辐射通过吸收层产生的总吸光度等于吸收层内各吸收物质产生的吸光度值和 $A = \sum A_i$，这是进行混合物光度分析的基础。

吸光度比值法 absorbance ratio method 利用吸光度的比值求出样品组分含量的方法。基于吸光度的加和性，在某一频率处测得的总吸光度等于各吸光组分的吸光度之和。对于一个两组分 A 和 B 体系，各组分都有互不干扰的特征吸收峰(或者组分 A 在频率 1 处的摩尔吸收系数 a_{1A} 远大于组分 2 在频率 1 处的摩尔吸收系数 a_{1B}，组分 B 在频率 2 处的摩尔吸收系数 a_{2B} 远大于组分 A 在频率 2 处的摩尔吸收系数 a_{2A})，则在频率 1 处和频率 2 处测得的吸光度 $A_1 = a_{1A}b_Ac_A$，$A_2 = a_{2B}b_Bc_B$，由于 A_1，A_2 在同一薄膜获得，$b_A = b_B$。令 $R = A_1/A_2$，$K = a_{1A}/a_{2B}$，则 $R = K \times c_A/c_B$，又 $c_A + c_B = 1$，故

$$c_A = R/(K+R); \quad c_B = K/(K+R)$$

式中，K 值可由作图法获得，配制一系列 A 和 B 不同比例的标准混合液，分别测定 A_1 和 A_2，以 R 为纵坐标，c_A/c_B 为横坐标作图得一曲线，该曲线得斜率即为 K。比值法不需考虑样品厚度，特别适合于红外分光光度法中溴化钾压片法、油磨法或薄膜法的定量分析。

吸留共沉淀 occlusion coprecipitation 共沉淀现象中的一种。在沉淀过程中，如果沉淀生成太快，则表面吸附的杂质离子来不及离开沉淀表面就被沉淀上来的离子所覆盖，杂质就被包藏在沉淀内部，引起共沉淀。吸留引起的共沉淀的程度，也符合吸附规律。

吸热峰 endothermic peak 在差热分析中，当试样温度低于参比物温度(即 ΔT 为负值)时所记录的差热曲线上的峰。

吸收 absorption 物质吸收其他实物或能量的过程。(1) 实物的吸收：一种物质吸收另一种物质进入内部并与之融合或化合的过程。例如，硫酸或生石灰吸收水分，血液吸收养料，固体或液体吸收空气或其他气体等。(2) 辐射或能量的吸收：①表面吸收，指投射到介质表面的辐射(如声波或电磁辐射)，一部分被表面反射，另一部分被表面吸收后转变为其他形式的能量；②内部吸收，指能量在介质中沿某一方向传播时，随入射深度逐渐被介质吸收的现象，例如玻璃吸收紫外线、金属吸收 X 射线、水吸收声波等。分析或分离化学中常常利用实物的选择性吸收对混合物进行分离或回收。

吸收电流像 image of adsorption current 利用吸收电子作为检测信号的扫描电子像。它是在入射电子射入样品后，经多次非弹性散射并且能量耗尽而形成的。吸收电流像的衬度与

次级电子像和背散射电子像的衬度相反。因此，吸收电流像可以用来表示表面元素分布状态和样品的表面形貌，尤其是样品裂缝内部的微观形貌。

吸收定律 absorption law 表征物质吸收辐射所遵循的规律。1729 年布给（P. Bougouer）首先提出了辐射吸收与吸收层厚度之间的关系，1768 年朗伯（J. H. Lambert）又重新表述了这一关系，单色辐射通过吸收介质时，辐射强度随吸收层厚度增加呈指数地减弱。1852 年比尔（A. Beer）提出了辐射吸收与吸收物质浓度的关系，单色辐射通过一定厚度吸收层的物质时，辐射强度随吸收层内物质浓度增加呈指数地减弱。辐射吸收定律可以表示为

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \varepsilon c l$$

式中，A 是吸光度；I_0 和 I 分别为入射和透射辐射强度；c 是吸收物质的物质的量浓度；l 是吸收层的厚度；ε 是摩尔吸收系数。ε 的含义是浓度为 $1\text{mol} \cdot L^{-1}$ 的物质在 1cm 吸收层厚度内吸收辐射产生的吸光度值，依赖于吸收物质的性质和辐射频率，表征物质对特征频率（波长）辐射的吸收能力。它是吸收光谱定量分析的基础。

吸收陡变 absorption jump 物质的质量吸收系数在 X 射线吸收限处的突变。在一般情形下，物质的质量吸收系数是随入射 X 射线波长的增加而增加的，但当波长增加至超过某些临界值时，质量吸收系数会突然下降而形成突变点。这些突变点的出现是因为随着波长的增加，X 射线光子的能量下降，当下降到不足以逐出吸收体中某一元素某一能级的内层电子时，就会引起质量吸收系数的突然下降。质量吸收系数在 X 射线吸收限短波长侧的极大值和长波长侧的极小值之差就被称为吸收陡变。

吸收陡变比 absorption jump ratio 质量吸收系数在 X 射线吸收限短波长侧的极大值和长波长侧的极小值之比。对于指定的元素而言，对应于某一能级 q 的吸收限两侧，以$\mu_m(\lambda_q)$表示吸收限短波长侧质量吸收系数的极大值，$\mu_m'(\lambda_q)$表示吸收限长波长侧质量吸收系数的极小值，则 $S_q = \frac{\mu_m(\lambda_q)}{\mu_m'(\lambda_q)}$称为该元素能级 q 的吸收陡变比。测定元素各能级的吸收陡变比，可预测相应荧光谱线的强度值。

吸收峰 absorption peak 又称最大吸收。吸收光谱中有吸收极大值的部分。吸收峰对应的波长，称为极大吸收波长。一个吸收光谱可以有多个吸收峰。它可用来鉴别产生吸收光谱的物质。测量吸收峰的吸收强度可以确定产生吸收物质的量。

吸收峰的强度 absorption peak intensity 红外吸收峰强度决定于跃迁的几率：跃迁几率 $\propto |\mu_{ab}|^2 E_0^2$，式中 E_0 为红外电磁波的电场矢量；μ_{ab} 为跃迁偶极矩。它不同于分子的偶极矩，它反映振动时偶极矩变化的大小。当分子中含有杂原子时，其红外谱峰一般都较强。反之，两端取代基

差别不大的碳-碳键的红外吸收则较弱。

吸收峰的位置　position of absorption peaks　孤立地看，每种基团吸收红外线的波长（或波数）应固定不变。但事实上，由于同一种基团在不同分子中所受到的诸如化学键两端的原子质量以及化学键力常数、化学键的振动形式以及分子内部与外部的因素等影响不同，每种基团的特征峰都是在一定的波长（或波数）范围内出现。

吸收光谱　absorption spectrum　亦称吸收曲线（absorption curve）。将不同波长的单色光依次通过被分析物质，逐点测定或扫描各对应波长处的吸光度，绘制所得吸光度-波长（或波长的其他函数）曲线，称为该被分析物质的吸收光谱。吸收光谱是物质分子对不同波长光的选择性吸收的结果，是对物质进行光度定性、定量分析的基础。吸收光谱是带状光谱。

吸收校正　absorption correction　利用各种实验和理论的方法，消除或减小由于晶体样品在不同方向上对入射和衍射X射线吸收程度不同对衍射强度的影响。对非球形的晶体样品而言，当入射和衍射方向不同时，X射线在样品晶体中通过的通道长度不同，从而会引起不同程度的吸收，使最终检测到的X射线强度不能真实地反映样品的晶体结构。

吸收强度表示法　absorption intensity expression　分为峰值强度和积分强度两种表示法。峰值强度即最大吸收强度，以摩尔吸光系数 ε_v 表示。积分强度指吸收谱带所包络的面积。实验上测得的积分强度是在有限狭缝宽度测得的吸收谱带的表观积分强度。各种仪器的积分强度值可以进行比较；而峰值强度依赖于狭缝宽度，需指明测定时所用狭缝宽度才能进行比较。

吸收曲线　absorption curve　即吸收光谱。用分光光度计记录到的物质对不同波长光的吸光度（或透射比）与波长（或波数）的关系曲线（图谱）。它反映了吸收物质的特性，据此可以对吸收物质进行定性和定量分析。

吸收系数　absorption coefficient; absorptivity　早期的文献中亦称消光系数。辐射垂直通过吸收介质时，单位厚度吸收物质吸收辐射引起辐射强度相对减弱的程度。当一强度为 I 的单色辐射垂直通过吸收介质时，被吸收减弱的程度 $\mathrm{d}I$ 与入射辐射强度 I 及吸收层的厚度 $\mathrm{d}l$ 成正比，$-\mathrm{d}I=\mu I\mathrm{d}l$ 或 $\mu=-\frac{\mathrm{d}I}{I\mathrm{d}l}$。式中，$\mu$ 为吸收系数，表示单位吸收层厚度引起的入射辐射强度相对减弱 $-\frac{\mathrm{d}I}{I}$ 的程度，依赖于吸收层内吸收物质的浓度（量）、测量波长。$\mathrm{d}l$ 可用长度、单位面积的质量、单位面积的摩尔数或单位面积的原子数表示，这时 μ 相应称为线吸收系数、质量吸收系数、摩尔吸收系数和原子吸收系数。

吸收线　absorption line　原子吸收

光源辐射产生的谱线。在原子吸收光谱分析中，基态原子吸收共振辐射从基态跃迁第一激发态产生的谱线，称为共振吸收线。通常用它作为分析线。

吸收信号 absorption signal 见**色散信号**条。

吸收因子 absorption factor X射线衍射强度表达式中与吸收效应有关的校正因子。对于非球形的晶体样品而言，吸收因子的大小与晶体的外形、它在衍射仪上的指向以及衍射的方向有关，可以通过实验或理论方法确定各个衍射的吸收因子。

析出电位 deposition potential 电解时电解质开始在电极上析出的电位。

硒的价态分析 valence analysis of selenium 确定试样中硒的不同氧化态的方法。硒是人体必需微量元素，但过量时毒性极大，并有明显蓄积作用。硒的化合价有 -2，0，+4 和 +6。硒在地面水中最高允许浓度为 $0.02mg \cdot L^{-1}$，生活饮用水中最高允许浓度为 $0.01mg \cdot L^{-1}$。痕量硒(Ⅳ)与4-硝基邻苯二胺作用的生成物可用甲苯萃取后气相色谱法测定。而硒(Ⅵ)不能与此试剂反应，据此差异，可以分别测定硒(Ⅳ)和硒(Ⅵ)。

稀核 dilute nuclei 同位素丰度低的核素。最常见的稀核的核素有 ^{13}C，^{15}N，^{17}O，^{33}S，^{57}Fe 等。在蛋白质等生物分子结构的核磁共振研究中常用 ^{15}N 等同位素富集的试样。磁性弱的稀核的相对可接受度比较小，较难研究。参见**磁性核的相对可接受度**条。

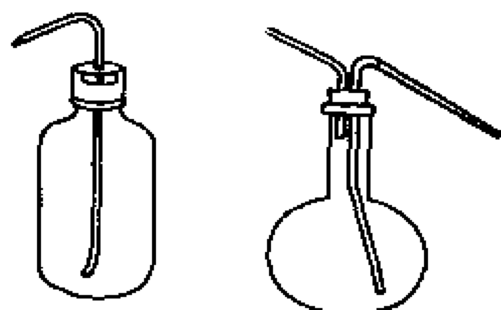
稀释 dilution 在较大浓度的溶液中，再加入溶剂使溶液的浓度变小，称为稀释。所加的溶剂称为稀释剂。如培养基内抗生素的含量按几何级数稀释并接种适量的细菌，经孵育后，观察能引起抑菌作用最低抗生素浓度，称稀释为最低抑菌浓度（MIC），表示该菌对药物的敏感度。稀释法所获得的结果比较准确，常被用作其他方法的标准。稀释法尚分为试管稀释法、琼脂稀释法、微量稀释法及自动化稀释法等。

稀释平板法 dilution plate method 细菌对抗菌药物敏感性试验的体外测定方法。首先将被检菌接种于一组含不同浓度药物（浓度 $0.25 \sim 128\mu g \cdot ml^{-1}$）的琼脂平板上及一个无药对照琼脂平板上，每一平板最多可接种12株菌，经培养后，观察细菌生长情况。以能抑制细菌生长的最低药物浓度为该菌株的最小抑菌浓度(MIC)。

席夫碱 Schiff base 由伯胺（R^1NH_2）与醛（R^2CHO）或酮（R^3COR^4）反应缩合得到的具有 $R^1N{=}CHR^2$ 或 $R^1N{=}CR^3R^4$ 结构的化合物总称为席夫碱。低级脂肪醛的席夫碱不稳定，易发生聚合反应。席夫碱一般反应性强，在酸或碱中容易分解。2-羟基苯胺-*N*-水杨叉替及其8种衍生物（芳族席夫碱）可与 Al^{3+} 或 Ga^{3+} 反应生成1:1的荧光性配合物，用于这两种离子的高灵敏度测定。

洗白 wash "wtite" 在记录图谱时，每当绘图笔走到它的前面轨迹已画出的峰时自动提起不画的作图法。用此法绘制二维谱堆积图，图形清晰好看。

洗瓶 wash bottle 分析实验中用于定量转移溶液，以及过滤洗涤沉淀、定量转移沉淀时常用的一种仪器，形状如下图所示。



聚乙烯，挤压型　　玻璃，吹出型

洗脱剂 eluent 色谱分离过程中，用于将置于分离柱一端的样品组分带至另一端的流动气体或液体。由于样品中各组分在分离柱的固定相上吸附或在洗脱剂中溶解能力的不同，导致在洗脱剂流过分离柱时，各组分在分离柱上的移动速度不同，从而被依次带出分离柱，达到分离的目的。一般要求选用的洗脱剂在分离柱固定相上的吸附和分配能力比样品组分小，且不能对流出组分的检测产生干扰；在制备或纯化分离时，应易于和流出组分分离。

洗脱强度 eluting power 又称洗脱能力。在色谱分析中，指流动相洗脱溶质组分的能力。

系间窜跃 intersystem crossing 处于激发态的原子或分子非辐射失活使自旋多重态发生变化的现象。大多数有机化合物其基态均处于单线态，在光激发下跃迁至第一激发单线态。从第一激发单线态向激发三线态发生系间窜跃，在一定条件下发磷光。从激发三线态回到基态的系间窜跃也会发生。系间窜跃的速度由自旋-轨道相互作用等磁相互作用的大小决定。

系谱概率 pedigree probability 生物遗传学中，系统分析某种性状或疾病在后代出现的可能性，推算某一子代是纯合子或杂合子的概率。

系统抽样 systematic sampling 又称等距抽样和机械抽样，将总体中的各样品按照某种标志顺序如时间顺序、地区顺序或其他的人为顺序排列，然后依照固定顺序或间隔来抽样。比如，每间隔一定的时间抽取一个或一批样品。这种抽样方法的优点是，保证样本单位在总体中均匀地分布，抽样方法简便，易于实施。

系统分析 systematic analysis 一类适于组分基本未知的无机定性分析方法。它先用几种试剂将试样溶液中性质相近的离子分成若干组，然后再在每一组中，用适当的反应鉴定是否存在某种离子。系统分析常分为三个阶段：（1）预试验。除观察试样颜色、气味等外，预试验包括有加热试验，熔珠试验，焰色试验，稀、浓硫酸作用试验，溶解性试验等；（2）阴离子分组和鉴定。从预试验，特别是稀、浓硫酸作用试验可大体了解可能存在哪些阴离子和不可能存在哪些阴离子；（3）阳离子分组和鉴定。

利用各种分离方法（如沉淀、溶剂萃取、离子交换等）将具有共性的离子分别归于数个大组，每个大组又分出几个仅含数个离子的小组，然后再用灵敏的试剂检出各小组中存在的各种阳离子。常用的沉淀分组的组试剂有盐酸，可溶性氯化物、硫酸盐、碳酸盐、磷酸盐，硫化氢，硫化铵，氢氧化钠（钾），过氧化钠以及水解后能产生硫化氢的化合物（如硫代乙酰胺）等等。但著名的无机阳离子系统分析法当首推基于硫化物溶解性差异建立的硫化氢系统分析法。

系统误差 systemic error 由某个或某些因素按照某一确定的规律起作用而形成的误差，使测定结果产生偏倚，影响测定结果的准确度。按其出现的规律，可以分为：（1）固定系统误差，对一组测量值的影响是相同的，使全部测量值都增加或减少某一固定量值，不增加测量值的波动性，因此，不影响测定结果的精密度；（2）比例系统误差，使一组测量值中每一个测量值都按同样的比例增加或减少，但相对误差保持不变；（3）服从其他规律的系统误差，如周期性系统误差。重复测定不能发现和减少系统误差，只有改变试验条件才能发现它，系统误差是可以设法校正和避免的。

系统消光 systematic absences 在晶体的 X 射线衍射图上，许多衍射点系统地、有规律地缺失的现象。根据系统消光规律，可以了解晶体所属的空间点阵型式，以及在各个方向上是否存在滑移面或螺旋轴，确定晶体所属的衍射群。有时通过消光规律可以惟一地确定晶体所属的空间群，有时则只能把可能的空间群缩小到几个，再通过其他手段，如分析衍射强度的统计规律，测定某些物理特性，试解晶体结构等，才能最后确定晶体所属的空间群。

细胞传感器 cytosensor 将细胞生物生理过程的行为（如新陈代谢，配体与受体的作用等）所反映出的电化学信息的变化转换成电信号从而实现对细胞代谢活性，配体与受体的作用、药物对细胞的作用等进行分析的传感器。

细胞电化学 cell electrochemistry 见生物电化学条。

细胞免疫 cellular immunity 广义的细胞免疫或细胞介导免疫既包括原始的吞噬作用，又包括 T 细胞介导的特异性免疫。狭义而言，仅指 T 细胞介导的免疫应答。T 细胞介导免疫应答的特征是出现以单核细胞侵润为主的炎症反应或/和特异性的细胞毒作用，前者是抗原刺激致敏 T 细胞后间接引起的；后者是受抗原刺激后致敏 T 细胞直接参与的。引起细胞免疫的抗原多为 TD 抗原。参与反应的 T 细胞主要是 T_H 和 T_s/T_c 两个亚群。近年来发现机体内其他细胞，包括外周血液内其他淋巴细胞如自然杀伤细胞和 K 细胞，也可介导细胞免疫。细胞免疫的主要作用是抗感染、免疫监视、移植物排斥、参与迟发型超敏反应和自身免疫病的形成、辅助 T 细胞

和抑制T细胞参与体液免疫的调节。

细胞膜受体　membrane receptors　具有信息传递功能的细胞膜表面受体。通过基因克隆技术已得到许多这类受体基因，并已测得其核苷酸序列和氨基酸序列。大致可以分为3类：具7个跨膜受体、具单一跨膜受体与通道环围多聚体。具有7个跨膜域的受体，很大部分被包裹在细胞膜内，每个受体在细胞膜内都有一段识别G蛋白的氨基酸序列。具有单一跨膜域的受体，大部分都暴露在细胞膜外面，受体只穿过细胞膜一次，这种结构使其易于移动和进行内吞（internalization），所传导的信息大多会产生长期的细胞核内的反应，几个大家族成员之间除了具有单一跨膜域这一共同特征之外，几乎没有相同的蛋白质一级结构。通道环围多聚体是单体在细胞膜上组装成的一个可供离子通过的孔道，离子和离子浓度本身作为信息传入细胞内，其传递过程受离子通道的开和关的调控，因而具有快递的特点。对这类受体中了解最多的是骨骼肌上的烟酸乙酰胆碱受体，它的所有亚基都穿越细胞膜，形成环形五聚体，其中心是一个离子通道。

细胞融合　cell fusion；cytomixis　是借助物理或化学手段，将两个或更多不同的细胞融合成一个细胞的过程。其结果是一个细胞含有两个或几个不同的细胞核，称为异核体。少数异核体来自不同细胞核的染色体，在随后的有丝分裂中，有可能合并到一个结合核内，则成为合核体的杂种细胞，因此又称为体细胞杂交。如果两个细胞中有一个为瘤细胞，则融合的细胞为杂交瘤细胞，此技术为杂交瘤技术。如果这个细胞系由一个融合细胞衍生而来，则称为单克隆。

细胞色素C电化学　cytochrome C electrochemistry　利用各种材料技术，表面修饰技术，分子自组装技术等研究细胞色素C氧化还原行为。试图通过细胞色素C电化学行为的研究揭示电子传递蛋白体在生物体系内是如何作用的，包括电子传递蛋白在生物体系内界面上的行为以及与生物界面结构，小分子参与作用的关系等。

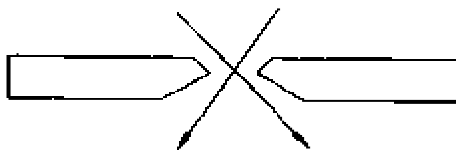
细胞系　cell line　原代培养物经首次传代成功后即成细胞系。由原先存在于原代培养物中的细胞世系所组成。如可以连续传代，可称为连续细胞系。如不能继续传代或传代数有限，可称为有限细胞系。

细胞株　cell strain　通过选择法或克隆形成法以原代培养物或细胞系获得的具有特殊性质或标志的培养物。它的特殊性质或标志必须在整个培养期间始终存在。

细菌发光　bacterial luminescence　发光细菌具有两种酶：荧光素酶和NAD（P）H：FMN氧化还原酶。荧光素酶在有氧气的情况下，催化$FMNH_2$和长链脂肪醛的氧化，产生FMN和长链脂肪酸并发光。NAD（P）H：FMN氧化还原酶使FMN还原成$FMNH_2$。这种发光现象称为细菌发光。利用细菌发光反应可测定酶

和底物的含量。

狭缝 slit 光谱仪的主要部件之一，是一个来自光源的光进入摄谱仪的狭窄的长方形孔口通道。由光谱仪分光而得到的每一条谱线都是狭缝的像。光谱仪上的狭缝可分为：(1) 宽度不能调节的固定狭缝；(2) 单边可以调节的单边狭缝；(3) 双边可调节的对称狭缝。谱线的强度、宽度及实际分辨率直接受到狭缝宽度的影响。因此，狭缝必须具有很高的精度，并且可以方便地进行调节。一般光谱仪多用对称开闭狭缝，它由两片不锈钢制的颚片组成。颚片边缘磨成45°的刀刃，使较斜的光线也可通过。斜边朝向光谱仪内部，以防光线被其反射进入光谱仪。狭缝宽度用手轮调节，其读数精度可达1μm。如下图。



狭缝程序 slit programme 光栅型仪器上能自动平衡光能量的程序部件。红外光源辐射的能量随波长的变化很大，如1500K黑体辐射的能量分布在2μm处最强，随着波长的增大能量逐渐降低，能量可以相差1000倍。为保持自动扫描至不同波数时照射在检测光路上的能量基本一致，必须使入射、出射狭缝随着光源的强弱而变化。狭缝的自动变化可以用一凸轮推动杠杆臂改变狭缝来实现，也可以是电动的，用电磁铁励磁开闭狭缝来实现。它们都由波数扫描电机来带动。

狭缝宽度 slit width 狭缝是分光光度计中单色器的主要部件之一。单色器的狭缝通常由两个具有锐刀口的金属片精密制作而成，两个刀口的平行性很好，并处于同一平面。通过调节狭缝宽度可改变谱带的有效带宽。狭缝宽度一般有两种表示方法：一种是以狭缝两个刀口间的实际宽度(mm)表示；另一种是以谱带的有效带宽(nm)表示，光谱狭缝宽度理论上是光谱带宽的两倍。实际分析中，若采用的狭缝过大，谱带的单色性变差，不利于定性分析，亦会影响定量分析工作曲线的线性范围；狭缝过小，光通量减小，将降低信噪比。

下行展开法 descending development method 在纸色谱法或薄层色谱法中，当点样后在展开槽中进行展开时，若展开剂载带样品斑点移动的方式是自上而下，即色谱斑点呈自上而下地分布时，称此种展开方式为上行展开法。

夏皮罗-威尔克检验 Shapiro-Wilk test 一种检验测量值分布正态性的方法。检验所使用的统计量

$$w=\frac{\left(\sum_{i=1}^{k}c_{i,n}(x_{n-i+1}-x_i)\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}$$

式中，i是将测量值由小到大顺序排列时的序次；n是测量值的数目；$k=\frac{n}{2}$（当n为偶数时）或$k=\frac{n-1}{2}$（当n为奇数时）；$c_{i,n}$是与n有关的系数，可从夏皮罗-威尔克检验表中

查到。w值在（0，1）之间，如果测量值来自正态总体，测量值分布近似对称，w值接近于1；若测量值不是来自正态总体，测量值分布不对称，则w值小于1，测量值分布不对称性越大，w值偏离于1越远。当由测量值计算的w值不小于约定显著性水平α的临界值$w_{\alpha,n}$时，可认为测量值遵从正态分布，否则，判测量值不遵从正态分布。

先驱离子 precursor ion 亦称母离子（parent ion）。是能产生其他离子的原离子。

纤溶酶测定 plasmin determination；PL 纤维蛋白与刚果红结合成不溶性复合物，在纤溶酶作用下，分解纤维蛋白后释放出刚果红。在酸性条件下呈蓝色反应，其蓝色深浅与纤溶酶活性呈正比，正常参考值为21～50u。血浆PL水平的高低反映纤溶活力的强弱。

纤溶酶原测定 plasminogen determination 用发色底物S2251或Chromozym等测定纤溶酶原活性（PLG：a），用免疫法测定PLG抗原（PLG：Ag）含量。正常参考值分别为80%～120%和（288±56）mg·L^{-1}。血浆水平的升高或降低反映纤溶活力的减弱或增强。

纤溶酶原激活抑制物测定 determination of plasminogen activated inhibitor；PAI 用发色底物法、酶联凝固法测定PAI的活性（PAI：A），用放射免疫法测定PAI抗原含量（PAI：Ag）。血浆PAI水平的升高或降低，反映纤溶活力的减弱或增强。

氙灯 Xenon lamp 利用氙的放电现象制作的灯。一种是氙短弧光灯，简称为氙灯。在石英管中封入氙气，在点灯过程中压力达10^7Pa以上，弧光直径集中在1mm以下，是一种高辉度的光源。发出的光与太阳光很相似，为连续光谱，紫外线很强。用作特殊分光光度计的光源，还用作人工太阳灯、电影放映灯等。另一种为氙闪光灯。在封有氙气放电管的两极接上高压充电的大容量电容器，用触发器放电，可以获得持续时间为数微秒至数十微秒的发强光的闪光灯。所发出的光在紫外-可见全波段为连续光谱。用于照相、闪光光分解、激光激发的光源。

酰胺Ⅰ amide Ⅰ 酰胺Ⅰ带的主要组成是两个氨基酸相互连接部分—CONH—中C═O的伸缩振动和N—H的面内变形振动，其中C═O的伸缩振动的贡献是主要的，其频率范围在1690～1600cm^{-1}之间。酰胺Ⅰ带在蛋白质结构的研究是最有价值的，蛋白质二级结构中的α-螺旋结构和β-折叠结构均在这一波段有表达。

酰胺Ⅱ amide Ⅱ 酰胺Ⅱ带的组成是两个氨基酸相互连接部分—CONH—中C—N的伸缩振动和N—H的弯曲振动，其中N—H弯曲振动的贡献是主要的，其频率范围在1575～1480cm^{-1}之间。

酰胺Ⅲ amide Ⅲ 酰胺Ⅲ带的主要组成是两个氨基酸相互连接部分

—CONH—中 C—N 的伸缩振动和 N—H 的弯曲振动。其频率范围在 $1301 \sim 1229cm^{-1}$之间。

显色器 color-developing sprayer 在色谱纸或薄层色谱中，展开后的色谱纸或薄层板上被分离的组分（无色物质）需要用适当的显色方法使斑点显现出来，用于喷洒显色剂的工具称为显色器，常用的有两种：一种是喷雾器，另一种是浸板器，这两种显色器均可进行手工和自动操作。

显微分光光度计 micro-spectrophotometer 一种把分光光度计和多用途显微镜相结合的分析仪器，可在显微镜下对生物样品微细结构中的化学物质进行超微量分析。

显微结构分析 micro structure analysis 研究表面的原子排列，包括确定平滑单晶表面或其吸附层周期排列原子单元网格的形状和大小，吸附原子相对基底原子的位置以及单晶表面第一、二、三层原子的三维排列，也包括用特种显微镜直接观察晶体或无定形材料表面一个个原子的排列并区别原子的归属。

显微镜分析 microscopic analysis 又称显微结晶分析。指在显微镜下进行溶液中的离子反应，根据形成结晶的形状进行分析判断的方法。

显微拉曼光谱 microscopic Raman spectroscopy 利用显微分析装置，将激光聚焦到很小的特定区域（束斑面积最小可达 $1\mu m^2$），测定其拉曼光谱，所得光谱即为显微拉曼光谱。显微拉曼光谱特别适合于不均匀物质的分析，可广泛应用于半导体、陶瓷和生物活体的分析中。

显微形貌分析 micro topography analysis 即主要利用电子和离子显微镜来研究样品表面的宏观外形。是最常用的显微分析内容。常用的分析方法有扫描电镜、透射电镜、扫描隧道显微镜、原子力显微镜以及离子显微镜等。

显线法 line-enhanced method 显线法就是谱线显现增强法。元素含量低时，仅出现少数灵敏线，随着元素含量增加，一些次灵敏线与较弱的谱线相继出现，于是可以编成一张谱线出现与含量的关系表，以后就根据某一谱线是否出现来估计试样中该元素的大致含量。显线法的优点是简便快速，其准确程度受试样组成与分析条件的影响较大。

显影液 developer solution 用于使曝光的卤化银还原为银的试液，包括显影剂、加速剂、保护剂和抑制剂。

显著性差异 significant difference 被检验参数之间的差异超过在一定显著性水平 α 时所允许的合理误差范围。被检验参数之间是否存在显著性差异可从统计上进行检验，此称显著性检验。

显著性检验 test of significance 从统计上对被检验参数之间是否存在显著性差异所进行的检验。它是检验事先所做出的关于总体参数的原假设 H_0 同随机样本值之间是否存在显著性矛盾，如果由样本值计算的统计量

值小于一定显著性水平 α 下的临界值而位于接受域内，表明 H_0 与样本值之间不存在显著的矛盾，就接受 H_0。反之，如果由样本值计算的统计量值超过一定显著性水平 α 下的临界值而落入拒绝域内，则称被检验的参数之间在统计上有显著性差异，就拒绝 H_0，而接受另一个备择假设 H_1。

显著性水平　level of significance　统计检验时限制犯第一类错误的概率。表示统计假设同样本值存在显著性矛盾的程度。测定值是随机变量，其值随所取样本而变化，因此，根据样本值来进行统计检验时有可能犯错误，在某些情况下，即使原假设同客观事实并没有显著的矛盾，由样本值计算的统计量值仍有一定的概率落入拒绝域内，从而拒绝原假设。这类错误在统计上称为第一类错误，犯这类错误的概率为 α，α 越小，由样本值计算的统计量值落入拒绝区的概率就越小，在这种情况下，如果由样本值计算的统计量值仍然落入拒绝域内，表明原假设同样本值的矛盾越显著，故将 α 称为显著性水平。

现场方法　field methods　例行分析实验室、监测站、生产车间等实际使用的测量方法。它通常是准确度和精密度能满足现场分析的需要，而操作又比较简便、快速。

现场分析　at-line analysis　是过程分析的一种形式。现场分析较离线分析前进了一步，是将分析仪器和设备搬到生产现场，就近进行分析化验的做法。因此，有一批"高速分析仪"应运而生，省去了运送样品和返回化验报告的时间，但在多数情况下仍嫌滞后。

现场分析与监测　field analysis and monitoring　在直接从事试验，并取得试样的场所进行的分析和监测，是更迅速、更简便取得污染原始数据的重要手段。在常规监测时，某些测定项目可以或必须在现场进行，如温度、噪声、pH 值、溶解氧、水中 CO_2 和汽车尾气等。现场分析的好处是可以避免样品在采集、运输和贮存时发生变化而使测定结果不准确。常用的办法主要有三类：监测车，如适用城市大气常规污染监测及野战毒物检查用的专用流动设施；监测船，适于江、河、湖、海的水质普查；监测箱或检毒包，用于异常致毒的调查和处理，系一类便携式小型简易试剂和仪器的组合。

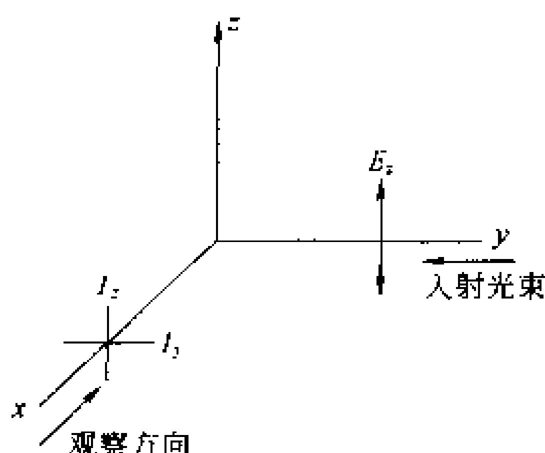
现场空白控制　control of blank value in situ　在现场试验中为控制空白值所必须实施的有计划有系统的活动。参见**空白值控制**条。

线宽交替　linewidth alternation　也叫做交替线宽。是在观测存在化学交换的自旋体系的 ESR 谱时经常出现的现象。在化学交换过程中，若体系内存在几个（或几组）磁性核，虽然时间平均效果是等性的，但瞬态情况并不等性，则称这几个（或几组）磁性核不是完全等性的。当测定该体系的 ESR 时，

若化学交换速率很慢，则观测到的相当于完全不等性的几个（或几组）磁性核的ESR谱；若化学交换速率很快，则观测到的相当于完全等性的几个（或几组）磁性核的ESR谱。若化学交换速率处于两者之间，则观测到的ESR谱中会出现交替线宽现象，即一部分谱线属于正常谱线，而另一部分谱线则明显变宽，此时ESR谱线之间的强度比已经不是正常的整数比关系。哪些谱线会变宽则由不完全等性的几个（或几组）磁性核的自旋量子数及它们的超精细耦合常数的相对符号所决定。

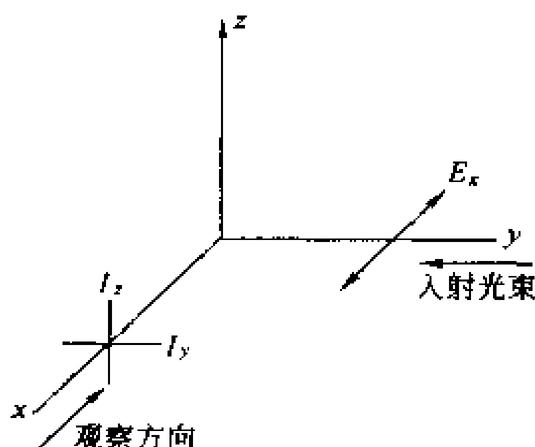
线内分析 in-line analysis 是过程分析的较高级形式，即将传感器放进生产流水线的液流中，直接对液流进行检测的在线分析形式。检测与生产同步进行，信息多能同步显示。目前多限于物理参数的测量，如pH、溶解氧和温度等。

线偏振光 linear polarized light 光发生偏振后，如果其电矢量的振动只局限于某一确定的方位，则称为线偏振光［见图（a），（b）所示］。电矢量振动方向与光传播方向组成的平面称为线偏振光的振动面。在发光光源中，因为无法控制发光分子或原子偶极子产生的光电矢量取向，所以只能获得光矢量在各方向振动几率统计相同的自然光；但可以通过光的反射、折射或在各向异性晶体中传播而从自然光中产生线偏振光。



（a）入射光正沿 z 轴偏振

$E_z \neq 0, E_x = E_y = 0$



（b）入射光正沿 x 轴偏振

$E_x \neq 0, E_y = E_z = 0$

线色散率 linear dispersion 线色散率是指波长相差 $d\lambda$ 的两条谱线在焦面上被分开的距离 dl。用 $dl/d\lambda$（mm/nm）表示。光栅的线色散率的表示公式是

$$\frac{dl}{d\lambda} = \frac{mf}{d\cos\beta}$$

式中，d 为光栅常数；m 为光栅级次；f 为物镜焦距；β 为衍射角。

线速度 linear velocity 载气在沿柱长方向上移动的速度，通常用平均

线速度 u 表示，其单位是 $cm \cdot s^{-1}$（厘米每秒）。

$$u = \frac{F_c}{S}；或 u = \frac{L}{t_M}$$

式中，S 为柱的横截面积；F_c 为载气平均流速；L 为柱长；t_M 为空气的保留时间。

线外分析 out-line analysis 又称非接触分析（nonivasion analysis）。是指检测器的传感头不直接接触生产流水线的液流，隔着管道采用反射式或透射式的测量手段。这是过程分析比较理想的简便测量方式，但目前尚不多见。

线形分析 line shape analysis 在俄歇电子能谱中，俄歇跃迁过程由于涉及到三个能级因而比较复杂，不仅有俄歇化学位移还存在俄歇峰形状的变化。一般这种峰形的变化来自元素所处化学环境的变化，因此，利用俄歇峰形的变化可以用来研究样品中元素的化学效应，该分析方法称为线形分析。

线性范围 linear range 在一定显著性水平下，拟合优度检验不存在失拟的条件下回归线所跨越的最大的线性区间。对于分析测试而言，是指通过拟合优度检验的校正曲线所跨越的最大浓度或含量范围。

线性回归 linear regression 又称直线回归。是用最小二乘法将因变量对自变量拟合为直线的过程。分一元线性回归和多元线性回归，前者是拟合因变量与一个自变量的线性函数，后者是拟合因变量与多个自变量的线性函数。

线性激光光谱学 linear laser spectroscopy 具有高强度、高单色性、极好空间和时间相干性的激光引入光谱学后，使经典光谱学和光谱分析得到了新的发展。当激光强度还没有大到超过物质产生非线性效应的阈值时，所形成的各种新光谱学技术和仪器称为线性激光光谱学。已经成熟、大量应用的线性激光光谱学技术和仪器有：激光拉曼光谱仪和激光拉曼光谱学，利用激光的高强度使只有 10^{-6} 量级的拉曼散射光更易准确、快速记录和分析，可提供分子结构、晶格振动等详细分析信息，也可直接对水溶液进行分析；激光光声光谱仪和光声光谱分析，由于激光作为高强度单色光源可使100多年前已发现的光声效应变成可实用的有效分析手段，不但可以对传统光谱仪器难以分析的不透明体、高反射体、高散射体、浑浊液、生物活组织等实现灵敏、准确的快速分析，而且也在痕量大气污染物检测领域成功应用；激光微区光谱仪和微区光谱分析，利用激光高强度、高单色性和高准直性，可聚焦成微米级高能量密度光斑，从而使高熔点、难熔物质瞬间气化，实现陶瓷、岩石等类试样分析，还可对生物活体实现微区无损分析。

线性内插法 linear inner interpolation 通常认为，匀排光谱或者挨得很近的谱线的分布是线性的；对于线性分布的情况，未知谱线的波长为

$$\lambda = \lambda_1 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\tau_2 - \tau_1}(\tau - \tau_1)$$

式中，λ_1、λ_2 为已知谱线的波长；τ_1、τ_2 为已知谱线的相应读数；τ 为未知谱线的读数。查出 λ_1 和 λ_2，测出 τ_1，τ_2 和 τ，则可计算出未知谱线的波长 τ。线性内插法虽然比较方便，但适用范围较窄。它要求色散率近似等于常数。对光栅光谱来说，未知谱线离已知谱线可以在百埃以外。对棱镜光谱仪来说，未知谱线离已知谱线必须在 1nm 以内。

线性凝胶色谱柱 linear gel chromatographic column 凝胶色谱柱中的填料孔径一定时，当高分子溶液注入凝胶柱内后，试样就会按分子尺寸的大小不同分开。如果以保留时间为横坐标，淋出试样分子量的对数为纵坐标作图，则在某一范围内可以得到一条直线，因而在此条件下凝胶色谱柱也称为线性凝胶色谱柱。对于不同孔径的填料，线性范围各不相同。线性凝胶色谱柱是针对一定的孔径范围而言的。

线性扫描伏安法 linear sweep voltammetry 将一快速线性变化电压施加于电解池上，并根据所得的电流-电压曲线进行分析的方法。可作为成分分析方法，也可用于研究电极过程的动力学性质。

线性扫描示波极谱法 linear sweep oscillopolarography 又称单扫示波极谱法。是将一快速线性变化电压施加于滴汞电极上，并用示波器记录所得的电流-电压曲线而进行分析的方法。该法灵敏度较高，检出限可达10^{-7}～10^{-6}mol · L^{-1}；分辨率较高，两波相差 50mV 也可分开；抗先还原的能力强，可利用电极反应可逆性的差异将两波分开；或利用峰电流比相应的扩散电流大得多，消除前波对后波的影响。

线性梯度 linear gradient 在某一段时间内连续而均匀地增加流动相强度的梯度程序。

线性吸收系数 linear absorption coefficient 1cm 厚的物质对 X 射线的吸收能力。物质对 X 射线的吸收也符合朗伯-比尔定律，即

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

式中，I 为透射光强度；I_0 为入射光强度；μ 为线性吸收系数；x 为透射通道长度。某一物质的线性吸收系数 μ 也可由其化学组成、密度 ρ 和组成元素的质量吸收系数 μ_m 算得

$$\mu = \rho \sum_{i=1}^{n} C_i (\mu_m)_i$$

式中，C_i 为第 i 种元素在吸收物质中的质量百分比；$(\mu_m)_i$ 是第 i 种元素的质量吸收系数。

线性预测法 linear prediction method 简称 LP 法。对于给定的弱平稳过程 $\{X_t\}$，对 X_s（$s \leqslant t_0$）的值施以线性运算用来求 X_t（$t > t_0$）近似值的方法。设自由诱导衰减（FID）或时域电子自旋回波数据是由多个复指数函数构成

$$nX_n = \sum_{j=1}^{m} a_j \exp\ (i\omega_j t_n)$$

利用指数的最基本性质，上式可改写成线性方程形式

$$X_n=\sum_{j=1}^{m}a_jX_{n-j}$$

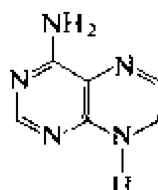
式中，a_j 称为线性预测系数，它是与 n 无关的。在已知某一时刻 t 以前的 X_n，利用最小二乘法解上述线性方程，可以推出 t 以后的 X_n。在进行傅里叶变换前，可用线性预测法作为线性过滤器，预测丢失的数据。在确定了线性预测系数以后即可将时域谱转化成频域谱。与傅里叶变换方法相比，使用线性预测法需要的数据量少，可节约测试时间，所得到的频域谱的分辨率高。但使用该法的前提是时域函数可表达为复数指数形式。

线状光谱 line spectrum 由于原子的光学电子在原子内能级之间跃迁所需的时间极短（如：激发态原子向低能级跃迁的时间是 10^{-8} s），产生的光谱呈线状，被称为线状光谱。

限制扩散理论 theory of restricted diffusion 是凝胶色谱分离机理的一种理论模型。它认为溶质的分离是基于不同尺寸的溶质分子在不同孔隙中扩散速度的差别，分子扩散速率是填料孔径和溶质分子半径的函数。比较大的溶质分子只能扩散到部分较大的孔隙中，因而保留值小；小分子不仅能扩散到大孔中，还能扩散到小孔中，所以其保留值大。限制扩散理论认为，溶质流经凝胶柱并没有在两相间达到平衡，所以其保留值存在流速依赖性。

限制性每日允许摄入量 conditional acceptable daily intake 对于一种限制性使用的农药，在某种病虫害尚没有替代农药进行有效防治的情况下，对其设定限制性每日允许摄入量。

腺嘌呤 adenine 核酸的主要组成成分之一，也是某些辅酶（如 NAD 和 FAD）的主要组成成分。其结构为



相对保留值 relative retention value 又称溶剂效率（α）。相对保留值表示某物质 1 的调整保留值与另一物质 2（或是标准物质）的调整保留值的比值，用 r_{12} 表示。它是一个无量纲的量。其关系式为

$$r_{12}=\frac{t'_{R1}}{t'_{R2}}=\frac{V'_{R1}}{V'_{R2}}=\frac{V_{N1}}{V_{N2}}=\frac{V_{g1}}{V_{g2}}$$

式中，t'_{R1}，t'_{R2}，V'_{R1}，V'_{R2}，V_{N1}，V_{N2}，V_{g1}，V_{g2} 分别表示组分 1 与组分 2 的调整保留时间、调整保留体积、净保留体积与比保留体积。相对保留值只与柱温、固定相性质有关，可从有关文献中查到。

相对比移值 relative R_f value 又称相对 R_f 值。样品斑点的 R_f 与标准对照物的 R_f 的比值。也即原点至样品点的距离与原点至标准对照物点的距离之比。参见**比移值**条。

相对标准偏差 relative standard deviation 标准偏差与平均值之比，以 RSD 表示。

$$RSD=\frac{S}{\bar{X}}\times 100\%$$

用来比较在量纲或数量级上不同的测定数据的相对离散程度的大小，可避免被测定量绝对值对标准偏差的影响。在过去的化学文献中，常将相对标准差称为变异系数，现在已不常用变异系数这一术语。

相对法（活化分析） relative method (of activation analysis) 将被测元素含量已知的标准样品与未知样品在相同的条件下接受辐照、处理和测量，根据标准和未知样品的相对放射性强度来确定未知样品中被测元素含量的一种活化分析方法。只要测定了经过 t' 时间衰变后相对放射性活度，就可以求得试样中被测元素的含量 W_s。

$$W_x = \frac{A_x}{A_b} W_b$$

式中，A_s 和 A_b 分别是 t' 时刻测得的未知和标准样品中的被测核素的放射性活度；W_b 是标准样品中被测元素的含量。该法的优点是消除了绝大多数与核参数及实验参数有关的误差，能获得高的准确度。缺点是不适合于事先未知的元素和多元素同时分析，获得与样品基体匹配的标准样品有时也有困难。参见**活化方程式**条和**绝对法活化分析**条。

相对分子质量 relative molecular mass; RMM 用对应于碳原子 ^{12}C 质量的 1/12 来表示某化合物的相当于一个分子的平均质量比的无量纲量，称为相对分子质量。某分子的分子量等于组成该分子的所有元素的相对原子质量之和，用 M_r 表示。

相对丰度 relative abundance 质谱图中各离子之间相对含量。在质谱图中，通常纵坐标以最强峰（基峰）为 100%，其他峰的强度与最强峰相比，得到相应的百分数，叫相对丰度。然后按各种离子的相对强度作图。另一种表示法是：把图中所有离子峰的强度加起来，设为 100% 纵坐标，各种离子按其强度，得到相应比例，作出质谱图。

相对挥发度 relative volatility 在处于两相平衡的体系中，组分 A 在蒸汽相中的摩尔分数与液相中的摩尔分数比值称为组分 A 的挥发度。

$$挥发度 = \frac{(X_A)_{汽}}{(X_A)_{液}}$$

若用蒸汽分压 p_A 来表示蒸汽相浓度，

$$挥发度 = \frac{p_A}{(X_A)_{液}}$$

对于 A 和 B 的二元混合物的相对挥发度为

$$\alpha = \frac{A\ 的挥发度}{B\ 的挥发度} = \frac{(X_A)_{汽}(X_B)_{液}}{(X_A)_{液}(X_B)_{汽}} = \frac{p_A(X_B)_{液}}{p_B(X_A)_{液}}$$

根据拉乌尔定律，$p_A = (X_A)_{液}\ p_A^0$，$p_B = (X_B)_{液}\ p_B^0$，式中，p_A^0，p_B^0 分别为 A，B 的蒸汽压，则

$$\alpha = \frac{p_A^0}{p_B^0}$$

在气相色谱中，相对挥发度与相对保留值（r_{12}）有关，表征相邻两组分分离的难易程度。相对挥发度越大，组分分离越容易，当相对挥发度

为1时，两组分不能实现分离。

相对校正因子 relative correction factor 某组分的绝对校正因子与标准物质的绝对校正因子之比，用 f 表示。

$$f = \frac{f_i'}{f_s'}$$

式中，f_i' 与 f_s' 分别为 i 组分和标准物质的绝对校正因子。相对校正因子与相对响应值互为倒数。它有3种表示方法：质量校正因子 $f_W = \frac{f_{i(w)}'}{f_{s(w)}'} = \frac{A_s}{A_i} \frac{W_i}{W_s}$；摩尔校正因子 $f_M = \frac{f_{i(M)}'}{f_{s(M)}'} = \frac{A_s W_i M_s}{A_i W_s M_i} = \frac{f_W M_s}{M_i}$；体积校正因子 $f_V = f_M = f_W \frac{M_s}{M_i}$；在数值上体积校正因子等于摩尔校正因子。式中 A_s、A_i 分别为标样 s 和组分 i 的峰面积；W_s、W_i 分别为标样 s 和组分 i 的质量；M_s、M_i 分别为标样 s 和组分 i 的分子量。

相对孔径 relative aperture 光学零件（或孔径光阑）的绝对通光口径大小不能直接决定光学系统相对通光能力大小。在应用光学中，以入瞳口径与该系统的焦距之比值 $\left(\frac{D}{f'}\right)$ 作为光学系统通光能力的表征值，称为相对孔径。使用相对孔径值，就可使不同通光口径、不同焦距的各光学系统通光能力有了可比性。在照相机镜头上，以相对孔径值的倒数（光圈数，如3.5，5.6，…）作为选择进入镜头能量多少的表征。在单色仪、摄谱仪、分光光度计等分析仪器中，光学系统相对孔径值直接决定分析仪器的灵敏度、检测信噪比。

相对灵敏度 relative sensitivity 待测物灵敏度 S_i 与相同量标准物质灵敏度 S_s 的比值称为该待测物的相对灵敏度，以 S' 表示：$S' = \frac{S_i}{S_s}$。

相对偏差 relative deviation 偏差与测定平均值之比。表示测量的相对精密度。

相对碳（质量）响应因子 relative carbon response factor 使用氢火焰离子化检测器（FID）时，在缺乏标准样品进行校正的情况下，可采用相对碳数（质量）响应因子进行定量计算。FID对有机化合物是通用型检测器，其信号与总碳原子的数量有关，可以直接用峰面积的百分数计算碳氢化合物的百分含量而不会导致很大的误差。尽管化合物的结构不同，单位质量碳原子的响应因子几乎相同，这样就简化了FID的定量校正因子计算，直接利用峰面积归一化法计算组分的含量，如下式所示：

$$W_i\% = \frac{A_i \cdot M_i}{C_i / \sum A_i \cdot \frac{M_i}{C_i}}$$

式中，W_i 为被测化合物 i 的质量百分数；A_i 为被测组分 i 的峰面积；M_i 为被测组分 i 的相对分子量；C_i 为被测组分 i 的总碳原子数；$\frac{M_i}{C_i}$ 就是定量

校正因子，有相同碳数的有机化合物有极其相近的 FID 相对碳响应因子。

相对误差 relative error 误差 ε 与被测量的真值 μ 之比，以 RE 表示。

$$RE = \frac{\varepsilon}{\mu} \times 100\%$$

在测定值遵循正态分布的条件下，多次测定的平均值 $\bar{x}$ 接近于真值 μ，是 μ 的无偏估计值。因此，在实际工作中常将相对误差表示为

$$RE = \frac{\varepsilon}{\bar{x}} \times 100\%$$

相对响应值 relative response 是指某一种物质的响应值与其相同量的基准物质的响应值之比。相对响应值 $s = \dfrac{\frac{A_i}{W_i}}{\frac{A_s}{W_s}}$，式中，$A_i$，$A_s$ 分别为该物质与基准物质的峰面积；W_i，W_s 分别为该物质与基准物质的质量。相对响应值只与待测物质、基准物质、载气等性质有关，而和操作条件无关。参见响应值条。

相干 coherence 相干是与一对本征态之间的跃迁相联系的。核自旋体系中两个态（$|i>$ 和 $|k>$）之间的跃迁可以用表征它们的磁量子数之差值 $P_{ik} = \Delta m = m_i - m_k$ 来描述它们跃迁的类型，或相干的类型。P_{ik} 称为相干的阶。$P_{ik} = \pm 1$ 的相干称为单量子相干，特称为横向磁化，只有它能被接收系统响应接收，其余的相干都不能直接检测出来。$P_{ik} = 0$，2 分别为零阶相干、二阶相干，后者又称双量子相干，以此类推，还有多量子相干，$|P_{ik}| \neq 1$ 的跃迁统称为多量子跃迁或多量子相干。用密度矩阵表示可以很好地描述自旋系统的状态及其运动规律。此时，密度矩阵元 $\sigma_{ik} = |i><k|$ 和 $\sigma_{ki} = |k><i|$ 表示态 $|i>$ 与 $|k>$ 之间的相干，矩阵元不为零表示存在着联系该两态间的跃迁。每个跃迁与两个阶数符号相反的相干 σ_{ik} 和 σ_{ki} 相联系。在自由进动周期中，每个相干保持其阶数 P_{ik} 不变。当施加射频脉冲时可以使 σ_{ik} 和 σ_{lm} 之间发生相干转移，相干阶数有相应的变化。参见**相干转移**条。

相干反斯托克斯拉曼散射效应 coherent anti-stokes Raman scattering; CARS 相干反斯托克斯拉曼散射与相干斯托克斯拉曼散射一样，是一种特殊的三阶非线性混频现象。设有频率为 ν_1 和 ν_2 的两束激光入射到样品上，假定 $\nu_1 > \nu_2$，且 ν_1 激光有足够的强度。当满足 $\nu_1 - \nu_2 = \nu_R$，ν_R 为分子的拉曼活性振动频率时，就会产生效率很高的混频。混频产生频率为 ν_3 的拉曼散射光，当 $\nu_3 = 2\nu_1 - \nu_2 = \nu_1 + \nu_R$，散射光频率既高于 ν_2，也高于 ν_1。此混频称之为相干反斯托克斯拉曼散射效应。CARS 由于 ν_3 出现在大于 ν_1 的高频侧，避开了荧光干扰，且其强度可以比正常拉曼散射强度高 $10^4 \sim 10^5$ 倍，在生物化学的研究中，CARS 是有价值的测试手段。

相干散射 coherent scattering 光在传播时偏离原方向而分散传播的现象，称为散射。其中，只改变了入射

光的方向，而没有引起入射光能量变化的散射称为相干散射。由于散射光的波长与入射光的波长相同，当有多个散射光源，且光源的相位差恒定时，散射光之间是能够相互干涉的。相干散射分为原子相干散射和分子相干散射，是X射线衍射的物理基础。

相干斯托克斯拉曼散射效应 coherent Stokes Raman scattering; CSRS 一种特殊的三阶非线性混频现象。设有频率为 ν_1 和 ν_2 的两束激光入射到样品上，假定 $\nu_1 > \nu_2$，且 ν_1 激光有足够的强度。当满足 $\nu_1 - \nu_2 = \nu_R$，ν_R 为分子的拉曼活性振动频率时，就会产生效率很高的混频。混频产生频率为 ν_3 的拉曼散射光，当 $\nu_3 = 2\nu_2 - \nu_1 = \nu_2 + \nu_R$，散射光频率 ν_3 低于入射光 ν_2，称为相干斯托克斯拉曼散射。CSRS 频率 ν_3 既低于 ν_2，也低于 ν_1，这就与受激荧光一样低于 ν_1、ν_2，在测量 CSRS 时，容易受到荧光的干扰，这限制了 CSRS 的应用。

相干转移 coherence transfer 密度矩阵能简单地表示核自旋体系的状态和运动。密度矩阵的非对角元称为相干项，它与单量子和多量子跃迁有关。相干项之间的转移，称为相干转移。在脉冲序列作用下引起布居数之间的变化或转移，称为极化转移。第 i 和第 k 能级之间的相干由密度矩阵元 σ_{ik} 和 σ_{ki} 表示。射频脉冲可以把 σ_{ik} 转变成 σ_{lm}。例如对二核自旋体系，用非选择性 π 脉冲作用于单量子相干项 σ_{12} 和 σ_{21}，可使之转变为另一个单量子相干 σ_{34} 和 σ_{43}，且相位相反。单量子相干之间的转移，称为磁化转移。若用非选择性 $90°_x$ 脉冲，单量子相干 σ_{12} 可转变成单量子相干 σ_{12}、σ_{34} 外，还转变成双量子相干 σ_{14} 以及零量子相干 σ_{23}。

相关 correlation 变量之间相随变动的关系。分为函数关系与统计关系两类，前者表示变量之间数量上的确定性关系，即一个或一组变量在数量上的变化，通过函数式所规定的数学等式可完全地确定另一变量在数量上的变化；后者表示变量之间的相随变动的某种数量的统计规律性，即一个变量只是大体上按照某种趋势随另一个或一组变量而变化，是在进行了大量的观测或试验之后所建立起来的一种经验关系。

相关分析 correlation analysis 描述变量之间统计关系的一种数学方法。用来研究变量之间是否相关以及相关的程度如何，相关的程度用相关系数表征，相关系数越大，表示相关的程度越大。相关分析与回归分析是有区别的，前者是研究一个变量或一组变量与另一个或一组变量之间的统计关系，诸变量之间没有自变量和因变量之分，都是随机变量；后者是研究一个变量（因变量）与一个或一组变量（自变量）之间的统计关系，所研究的变量有自变量和因变量之分，因变量只有一个，且为具有概率分布的随机变量，而自变量为无概率分别的非随机变量（固定变量）。从广义上讲，回归分析属于相关分析，是相关分析的一种特殊情况。

相关分子离子 molecular-related ion 在软电离时，常常获得一些与分子质量相关的离子。例如，质子化的分子（$[M+H]^+$），去质子的分子（$[M-H]^-$），附加上钠、钾、铵或溶剂的分子等（$[M+Na]^+$、$[M+NH_4]^+$等）。这些与分子质量相关的离子统称为相关分子离子。

相关光谱法 correlation spectroscopy 为消除背景干扰以及提高测定的灵敏度，将相关技术用于吸收光谱的方法。相关光谱法的技术关键是要设计出一个相关盘或称模拟复制光谱，即根据某一特定污染气体（例如 SO_2），吸收光谱中的某一吸收带（例如在 300nm 附近），预先复制出刻有一组狭缝的光谱型板（mask），狭缝的宽度与间距与真实的吸收光谱的波峰或波谷模拟对应。

相关系数 correlation coefficient 表征变量之间相关程度的一个参数。相关系数

$$r=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}$$

式中，x_i 和 y_i 分别是自变量和因变量的值；$\bar{x}$ 和 $\bar{y}$ 分别是自变量 x 和因变量 y 的平均值；n 是实验点的数目。在对所建立的工作曲线进行统计检验时，当由实验值计算的 r 值大于相关系数检验表中相应显著性水平 α 下的临界值 $r_{\alpha,(n-2)}$ 时，表明所建立的工作曲线是有意义的。r 的绝对值在 0～1 的范围内变动，r 值越大，表示变量之间相关的程度越大。当 y 随 x 增大而增大，称 y 与 x 为正相关，r 为正值；当 y 随 x 增大而减少，称 y 与 x 为负相关，r 为负值。

相交束激光诱导的热透镜测量 heat lens detection of intersect laser-induced 泵浦激光和探测激光共面垂直相交于毛细管检测点，样品吸收泵浦光能量产生的光热效应使通过其中的探测束发散，在远场探测束中心光强变化，即得到与样品吸收成正比的光热信号。

相似相溶原则 rule of mutual solubility 极性分子易溶于极性溶剂，非极性分子易溶于非极性溶剂。例如 I_2 易溶于 CCl_4 而在水中的溶解度很小。这是因为 I_2 和 CCl_4 是非极性分子，水是极性分子。相似相溶原则是由大量实验总结出的一条经验性规律，并不能说明所有物质的溶解情况。

相比率 phase ratio 在气相色谱中，相比是指气相与液相的体积比，以 β 表示。毛细管柱的相比值高，对该组分的容量比低，高分辨毛细管柱气相色谱法的相比最好在 100 至 500 之间。在毛细管柱上可以使用较低的温度进行分离。

相变 phase transition 不同相态之间发生的转变。相变的内容比较复杂，除了一般的相态（固、液、气）转变，还包括晶型之间的转变和介晶相之间的转变等。例如，液晶化合物 C_8H_{17}—⟨◯⟩—⟨◯⟩—CN 具有固相-近

晶相、近晶相-向列相、向列相-液相等介晶相之间的转变。

相变温度 phase transition temperature 不同相态之间发生转变时的温度。通常可简便地利用相变温度来鉴别物质和相变。

相分辨荧光 phase-resolved fluorescence 利用混合物中各荧光体荧光寿命的差异进行荧光光谱的分辨，激发光和荧光之间的相角和去调制因素计算荧光寿命的方法。当样品被激发光激发而发射荧光时，如激发光的光强度被正弦调制，其角频率为 ω，则荧光也同样被调制，调制的荧光比激发光在相位上延迟了 φ 角。荧光的调制比激发光的调制幅度要小，荧光改变部分的相对幅度与激发光的调制度之比为去调制因素 m。对于单指数衰变的荧光，纯荧光体在流体均匀的环境中满足如下关系：$\tan\varphi=\omega\tau$，$m=(1+\omega^2 v^2)^{-1/2}$。在测量相角 φ 或去调制因素 m 后，可以计算荧光寿命 τ。采用配备相灵敏检测器的相位荧光计，相灵敏检测器产生的直流信号与调制的荧光强度成正比，并和检测器与样品之间相位差的余弦成正比。若进行荧光光谱扫描，则满足 $F(\lambda,\varphi_D)=KF(\lambda)\cos(\varphi_D-\varphi)$。式中，$F(\lambda)$ 为稳态荧光光谱，λ 为波长；K 为常数，包含样品和仪器因素以及激发光的调制度。对于两组分荧光体混合物，如果把检测器相角调节到与一给定组分异相，即 $|\varphi_i-\varphi_D|=90°$，则该组分的荧光将被抑制，测得的相灵敏光谱是另一组分的稳态荧光光谱，其强度减弱至原来强度的 $\sin(\varphi_D-\varphi_B)$。由此，相分辨法可用以分辨两组分荧光体混合物中的个别组分。

相分析 phase analysis 对钢中各种第二相（复合材料内不同于基体的另外的相）进行的定性和定量分析，通常是指用电解方法将各种第二相抽取出，再对共存相进行分离，测定各相元素组成的分析过程。由分析结果可以了解合金中各组分间相互作用的规律。现代相分析采用电镜、X射线衍射、电子（离子）探针等多种技术，分析结果对于控制合金成分范围，选择热处理工艺，探讨合金化机理和故障分析都具有重要意义。

相角 phase angle 在 X 射线晶体学中指结构因子的位相。其物理意义为：在衍射 hkl 的衍射方向上，晶胞内全部原子对入射 X 射线的散射波叠加而成的复合波的相角与位于晶胞原点上的电子的散射波的相角的差值。

相角问题 phase problem 通过实测的衍射数据确定晶体结构的过程中必须解决的关键问题。晶体结构是根据电子密度函数，即电子密度在空间的分布而确定的。计算电子密度函数需要全部结构因子数据，而结构因子是由结构振幅和相角两部分组成的。从实测的衍射强度数据只能得到结构振幅，相角数据在目前和可预见的将来则是很难用实测手段获得的。目前各种解决相角问题的方法，如模型法、向量空间法、直接法、同晶置换

法等的共同特点是把已知的关于晶体结构的知识、结构化学知识及衍射强度信息等结合起来，将隐含在衍射强度数据中有关相角的信息挖掘出来，推测近似的相角，即适用的初始结构模型，再经过反复删改、修正，得出最终的晶体结构。可以说整个晶体结构的解析过程，即为破解相角问题的过程。

相敏检波 phase sensitive detection; PSD 检出特定频率信息的一种最简单的方法。它是利用相检波来实现的。相检波器是一个混频器，相当于一个模拟乘法器，它使输入信号与参考信号相乘，输出信号的第一项为差频分量，而第二项为和频分量。当差频为0时，只留下直流分量。在NMR、ESR相检波中，通常输入信号与参考信号同频率。其大小和极性与两信号的相位差的余弦及幅度乘积有关。此时检测出的信号，不能分辨相位差的正负。

相敏交流伏安法 phase-sensitive-A. C. voltammetry 利用相敏检波有选择地测定不同相位时的交流电流，使其获得测定的最佳选择，即讯号电流最大、充电电流的影响最小的一种交流伏安法。利用该法可以提高测定灵敏度，在可逆体系中检出限可达5×10^{-7} mol·L^{-1}。

相平衡 phase equilibrium 系统中物理和化学性质完全均匀的那一部分称为一个相。所谓相平衡是指系统中各相的组成与数量均不随时间而变化，即不同相虽然相互接触但宏观上在相间没有物质传递的状态。对于任意相平衡系统，其中任一物质B在它所存在的所有相中的化学势必相等。

相位记忆时间 phase memory time 在外磁场中处于热平衡的自旋体系，在适当脉冲的作用下，其纵向磁化强度M_0倒向平面，即在垂直于外磁场的平面上形成了自旋相位的相干。关掉脉冲后，这一相位相干将以时间常数T_2^*逐渐消失。T_2^*实质上就是相位记忆时间，它标志着相位相干能够持续多长时间，它包括两部分贡献：一是在自旋体系内部进行能量交换的自然过程，即自旋-自旋弛豫；另一部分是由于外磁场的不均匀性，使样品中不同部位的自旋感受到不同的磁场，这样它们的进动频率也略有不同，使相位相干消失速度加快。

相位校正 phase correction 光（波）谱仪调试不当或电子学方面的不完善会导致所得谱图相位畸变。相位误差可分为与频率无关的零级误差和与频率呈线性关系的一级误差。所得的谱峰必须加以相位校正，校正分自动和手控的。前者是利用计算机叠代程序（有绝对值法、乘积法和卷积法），反复加入不同相位因子，使吸收谱线在基线上面的面积达到最大，基线下面面积最小时为最终的谱图。后者是手动调节面板上的电位器，绘出电压信号变换成相位因子，由计算机程序计算校正，反复改变电位器值，直到在观测屏上得到左右对称的吸收线形为止。

相位循环 phase cycle 在傅里叶变换脉冲磁共振测试中，特别是在需要一定量的信号强度时，常采用相位循环技术，其目的主要是消除所测信号的相位和幅度的畸变、抑制干扰信号、提取有用信号。相位循环实际上就是将实验用脉冲（或一脉冲序列）或接收器的相位按一定周期规律改变，然后将在一个周期内具有不同相位的各脉冲（或脉冲序列）或接收器所得到的信号相加或相减，这样可以使干扰信号或相位、信号强度的畸变被抵消掉，而挑选出无畸变的有用信号。通常接收器可在0°，90°，180°，270°（或x，y，$-x$，$-y$）四个方位调整相位和接收。在NMR的多脉冲实验中，需要检测多量子跃迁。由于它们不能像在普通的NMR实验中的单量子跃迁可直接检测，因此需要施加读脉冲，将它们转化为单量子跃迁的形式。为保证只接收到某个多量子跃迁的信息，还需要不断改变读脉冲的相位。通常NMR实验中的纵向磁化，单量子相干和双量子相干对应于读脉冲相位有不同相位关系。例如在INADEQUATE脉冲序列中三个量与90°读脉冲相位的关系如下表。

读脉冲相位	纵向磁化	单量子跃迁	双量子跃迁及接收器相位
x	$-y$	x	x
y	x	y	$-y$
$-x$	y	x	$-x$
$-y$	$-x$	y	y

当读脉冲连续依次改变相位ϕ时，接收器也按表中相位循环一次。纵向磁化与单量子跃迁在相位交替累加时被抵消，只有双量子跃迁与接收器同相位而被检出。

香豆素 coumarin 为无色结晶。熔点71℃。苯基-α-吡喃酮为邻羟基肉桂酸的内酯，由邻羟基苯醛与无水醋酸及醋酸钠反应得到。是草的芳香成分，也存在于草的茎中，是一种香料。其衍生物中有7-羟基香豆素（伞型酮）、7-羟基-6-甲氧基香豆素等。香豆素衍生物可用作激光染料。

响应时间 response time 又称应答时间。指从测量开始到获得相对稳定分析信号所需的时间。不同的分析领域，响应时间的具体定义有所不同。在电子选择性电极测量中，响应时间是指离子选择性电极由一种活度值的试液转入另一活度值的试液时，建立平衡电势值所需的时间。按IUPAC推荐，定义实际响应时间为离子选择性电极与参比电极接触试液，到电极电势与稳态值相差1mV所需的时间。而在色谱分析中，响应时间是指以一定浓度的试样连续通过检测器，得到一个输出信号，当试样浓度突然变化，输出信号达到新平衡条件的63%时所需要的时间。

响应值 response 是指被分离的组分通过检测器响应后所给出的信号值，一般以电压（mV）或电流（A）表示。物质响应值的大小取决于物质的物理、化学性质和浓度，同时也与检测器本身的灵敏度有关。不同的物质在同一检测器上，即使浓度相同，

也会给出不同的响应值；而同一种物质，在不同灵敏度的检测器上也会给出不同的响应值。每种物质的响应值可通过实验方法获得。

像差 aberrations 在光学分析仪器的光学系统中，由于光线偏离光轴远或光线在光学系统中行进角度大、成像视场大等原因，光学系统成像过程中往往会偏离理想的成像关系，因偏离理想成像过程而造成的结果称为像差。从原理上分，光学系统的像差分两大类：因光学材料对不同波长具有不同折射率而造成的色差，因光学器件表面形状和光线入射孔径角或视场角而造成的单色光像差。色差有位置色差和放大率色差两种，单色光像差则有球差、彗差、像散、场曲和畸变五种。像差的存在会使光学系统成像模糊、变形和颜色失真。

像差校正 aberration correction 为了消除由于像差而使光学系统成像质量恶化后果，必须在设计光学系统时设法对每一种像差采取适当措施进行像差校正。对于色差，可采用具有不同色散率（折射率对波长的函数关系不同）的光学材料（不同成分组成的光学玻璃、天然或人造石英晶体、各种光学单晶等等），并精确计算并制造出适当的透镜折射面形状及其曲率半径、厚度、彼此间隔距离等。对于各种单色光像差，除了上述措施以外还常常用限制或改变光学系统的光阑、孔径、视场等办法，以及采用非球面透镜等特殊措施来减小单色像差，并在各种单色光像差残存值之间作出折中和抉择，尽可能针对具体应用要求达到最满意的成像效果。像差校正效果直接与光学系统装配精度有关，所以光学分析仪器中的光学系统、任何光学零部件都不能轻易拆卸、分解或任意擦拭，更不能任意替换镜片，否则将使成像恶化甚至整个光学系统失效，不经专业厂的专业技术人员采用专门的精密设备是不可能修复的。

像点 image point 由发光点发出的所有光线在介质中传播时，经过介质面上发生反射、折射后，各条光线（或它们的反向延长线）若又会聚在同一点上，则这一点称为像点（发光点可称为物点）。由物点发出光线形成像点的过程，称为成像；物点和像点是对应存在的（称为共轭），一个物点经过理想的成像过程只能形成一个理想的像点。

像散 astigmatism 当发光点位于光学系统（例如一块透镜）光轴以外时，它发出的空间光线在不同方位会受到不同程度的折射，因而会在不同距离形成像点，这种像差称为像散。例如从轴外一个物点发出在两个互相垂直的平面上行进的光线，经过透镜后在离透镜距离不等处分别会形成两条非但不相遇而且彼此互相垂直的短焦线，不是理想状态时一个像点。由于在实际光学系统中，光线都以相当大的孔径（保证有足够的光强度）、不小的角度（足够大的视场）通过光学系统，因而会产生相当大的像散，使成像质量严重受损。

所以，像散是一种影响严重而必须予以尽可能校正的单色光像差。在电子显微镜中，由于电磁透镜磁场的非旋转对称性，使透镜在相互垂直的方向上聚焦能力有差异，造成图像模糊，称为电镜的像散。在电子光学系统中均存在像散现象，像散的消除和校准对提高图像分辨率具有重要意义。

像散补偿 astigmatism compensation 在透镜分析中为了抵消像散而采取的措施。因为像散是透镜磁场非对称旋转所引起的，因此常通过引入一个强度和方位可调节的校正磁场来补偿。

消除水峰的 FT 方法 water eliminated FT；WEFT 对于只能溶于水的试样，水峰务必抑制。若水的 T_1（H_2O）与试样的 T_1（试样）之比≥3 时，可利用反转回复法测 T_1 原理 $\left(\pi\text{-}\tau\text{-}\frac{\pi}{2}\text{采集 FID}\right)_n$ 脉冲序列。设定 $\tau=0.69T_1(H_2O)$，则水的纵向磁化恢复到刚好通过零点，而样品中质子由于 T_1 短，已恢复到较大纵向磁化量。这时加 90°观测脉冲，检测得到样品的磁化量，经过傅里叶变换（FT）得到无水峰的样品 ^1H 谱，从而隐藏在水峰信号中的信号也能检出。

消除速率常数 elimination rate constant；k_e 表示单位时间内药物通过生物转化，肾脏排泄及其他途径从体内消除的份数。一级消除速率常数与生物半衰期关系的数学表达式为

$$t_{\frac{1}{2}}=\frac{0.693}{k_e}$$

消光 extinction 由于入射 X 射线和衍射 X 射线被理想晶体的另一部分所衍射而导致最终收集到的衍射强度的衰减。消光分为初级消光和次级消光。在理想的完整晶体中，符合布拉格方程而产生的衍射线会进一步被另一部分晶体所衍射，从而使原衍射线的强度减弱，这种现象称为初级消光。同样，入射 X 射线在到达完整晶体的内部，产生衍射之前，由于前面一部分晶体的衍射，将使入射 X 射线有所减弱，从而导致衍射强度的降低，这种现象称为次级消光。

消光衬度 extinction contrast 当单晶样品中存在着缺陷，如位错或杂原子时，缺陷周围点阵畸变在 X 射线形貌图上造成的衬度。在常用的形貌方法中，入射 X 射线束的水平发散度通常被光阑限制在几分弧度角以内，其中只有很少一部分（几秒弧度角范围）能被一个完整的晶体所衍射，另外大部分（称为入射光束翼区）仍按原来的方向离开晶体成为向前衍射光束。在晶体缺陷附近，晶面将会由于应变而弯曲，使得发散的入射光束翼区也部分地参与衍射，在原来的均匀灰色背景上叠加上黑色的缺陷像。即晶体中的微观应变场破坏了完整晶体的原消光作用而使衍射强度增强，形成了消光衬度。

消耗型化学发光传感器 exhausting chemiluminescence sensor 将涉及分子识别反应和换能反应的全部试剂固定在柱中，组成一个流动注射系统。被分析物质通过分子识别反应柱

后所产生的化学量，能够与直接从换能器柱中洗脱下来的一定量化学发光试剂起反应，并将这一化学量转化为化学发光信号进行检测的传感器。该传感器利用了化学发光分析高灵敏度的特点，优化了发光量子产率，避免了在传感原件上直接发光所产生的散射光干扰。用于测定胆碱和乙酰胆碱的检出限均为500μmol，已用于鼠脑和人血清分析。

消像差凹面全息光栅 aberrations corrected concave holographic gratings 凹面刻划光栅受到刻划工艺限制，会产生明显的成像像差。用全息照相的方法制造凹面全息光栅时，可以根据凹面光栅的用途和成像质量要求计算出形成干涉条纹的干涉光束参数和全息干涉物、像点，从而用全息照相法可以刻划出非球面基底、不等距或弯曲栅线构成的异型全息凹面光栅，达到不同的消像差效果。现在已有Ⅱ型凹面消像散全息光栅（可对一个波长值在一个成像位置消像散）、Ⅲ型凹面消像散光栅（可对三个波长值、在三个成像位置处消像散）和Ⅳ型凹面消像差光栅（例如可应用于澈谷-波冈单色仪装置的光栅、超环面光栅、谐面平直光栅等等）。应该指出：限于技术和经济原因，所谓消像差凹面全息光栅只对特定用途达到一定消像差效果，不是完美的、到处可用的，而且昂贵。

消像散器 stigmator 在透镜内部为了抵消极靴的像散，产生一个相反的像散，而在透镜内部安装的可调校正装置。消像散器可以是磁极型的或静电型的。在现代高分辨电子显微镜中通常装置一个物镜消像散器和另一个第二聚光镜消像散器以校正照明系统的像散。

硝态氮 nitrate nitrogen 植物能直接吸收利用的速效性氮素，土壤中硝态氮含量随季节的变化和植物不同生育阶段而有显著的差异。硝态氮不易被土壤吸附，易遭淋失，硝态氮含量与土壤通气状况有密切的关系。土壤硝态氮的测定方法有酚二磺酸比色法、硝酸根电极法等。

小波变换多元光度法 wavelet transformation-multiple spectrophotometry 将分析信号分解成一系列具有良好时、频域局部化的基元信号，利用基原信号的各种特征来表征分析信号的局部特征，达到对信号的时、频域局部优化分析，将这种技术应用于多个组分光度法测量数据优化的方法称为小波变换多元光度法。一般来说，原始分析信号被分为带通成分（或含噪成分）和模糊分量（或有用信息）。该法由于具有正交性，方向选择性，可变的时频域分辨率，可调节的局部支撑等优良特性，常用于解决分析信号的异常点，降低仪器噪声，以获得稳定的波谱。

小角X光散射 small angle X-ray scattering; SAXS 散射角小于2°的散射。这种散射对原子尺寸的非均匀性无依赖性，而依赖于所存在的小粒子、具有不同电子密度的晶区与非晶区间的交替结构及存在于高聚物固体

中分散的微孔等不均匀结构。小角散射的强度随产生非均匀性的两个或更多区域间电子密度差的增加而增强。SAXS适于研究几至几十纳米范围内的结构信息，因此，特别适合与光散射技术一起剖析高聚物的二三级结构。

小角度激光散射检测器 small-angle laser scattering detector 一种根据光的散射原理制作的凝胶色谱检测器，用于合成高分子或生物大分子分子量的检测。利用这种检测器可以直接测定淋出液中溶质的重均分子量，是检测分子量的绝对方法。由于散射光强有角度和浓度依赖性，对于一般的光散射，测定要做浓度和角度的外推。但利用激光作为光源时，由于光束极窄而强度很大，能在角度很小、浓度很低的情况下测试，因此不需要外推。

小角激光散射光度计 low-angle laser light scattering photometer; LALLS 以激光作光源，检测散射角度在5°左右的低角度散射光的光散射检测器。因为散射光强有角度和浓度依赖性，所以必须测定几个浓度和不同角度下的散射光强，从而得到外推值。而LALLS的特点是光束集中且准直性好，因此可测量小角度及较稀浓度下的散射光强，避免了角度和浓度外推的麻烦。它是凝胶色谱中较理想的分子量检测器。

小面积XPS谱仪 small spot XPS 被测面积的直径仅有$10^2 \sim 10^3 \mu m$的XPS谱仪。采用小面积XPS具有许多优点：荷电问题基本不存在，可方便的测量绝缘性材料；由于并非X射线聚焦在样品表面上，故对样品的辐射损伤程度如常规XPS一样低；由常规XPS改造成小面积XPS不需改变X射线源、分析器或检测器，对真空系统也无干扰；被分析样品的位置及面积与电子动能无关。小面积XPS在实际应用中很有意义，与AES、SIMS可以互相补充。

小内径毛细管柱 microbore column 内径小于$100 \mu m$的弹性石英毛细管柱。当内径为$100 \mu m$时，其柱效可达每米柱长11000理论板数，此种柱子多用于复杂样品的快速分析。

效应混杂 effect confounding 因素主效应之间、因素主效应与因素间的交互效应、交互效应与试验误差效应混杂在一起。在对因素效应进行统计检验时，它会妨碍对因素效应的判断与对试验结果的分析，在试验优化设计时要避免发生因素效应混杂。如在试验中要有重复测定，以便将交互效应从试验误差中分出来；要有足够的自由度来估计因素之间的交互作用等。

协萃剂 synergistic extractant 在萃取体系中若使用两种或两种以上的萃取剂时，被萃取物的分配比显著大于每一种萃取剂在相同条件下单独使用时的分配比之和，则称这一体系有协同效应。每一种萃取剂都可能成为其他萃取剂的协萃剂。例如，二-(2-乙基己基)磷酸（HDEHP）从硫酸溶液中萃取六价铀时，加入磷酸三

丁酯（TBP）后，使分配系数大大提高，此时 TBP 就是 HDEHP 的协萃剂。

协同萃取 synergetic extraction 在溶剂萃取体系中加入两种或多种萃取剂时，若被萃取组分的分配比 $D_{协}$ 显著大于在相同条件下每一种萃取剂单独使用时的分配比之和，则称这一体系有协同萃取效应。利用这一现象进行的萃取称为协同萃取。例如，以磷酸双-（2-乙基己基）酯萃取硝酸铀酰[$UO_2(NO_3)_2$]，萃取剂与金属离子形成中性螯合物，但 UO_2^{2+} 的配位数尚未饱和，仍含有一些配位水分子。因此萃取分配比 D 不高。当加入另一种萃取剂磷酸三丁酯（TBP）后，TBP 可进一步与 UO_2^{2+} 络合，取代其中部分水分子，形成电中性、配位数饱和的稳定的萃取络合物，因而分配比大大提高。

协同凝集反应 co-agglutination reaction 携带 A 蛋白的金黄色葡萄球菌可结合 IgG 的 Fc 段，抗原结合段（Fab 段）仍可特异性地结合抗原。如果将某特定细菌抗原的特异性抗体吸附到金黄色葡萄球菌上，然后加入该细菌的悬液，该细菌就会与抗体包被的金黄色葡萄球菌发生协同凝集。

协同效应 synergetic effect 指两种试剂的联合反应比单独一种试剂反应产生的效应的总和要大的效应。在金属螯合物的萃取体系中，当两种萃取剂能与同一金属离子形成一种比单独反应时形成的简单的螯合物更容易萃取的物质时，常会出现其分配比的协同增强现象。例如，镁离子与 8-羟基喹啉（Ox）和正丁胺（Bu）形成 $Mg(Ox)_2(Bu)_2$；Eu（Ⅲ）与噻吩甲酰三氟丙酮（TTA）和磷酸三丁酯（TBP）形成 $Eu(TTA)_3(TBP)_2$ 都明显提高了萃取效率。

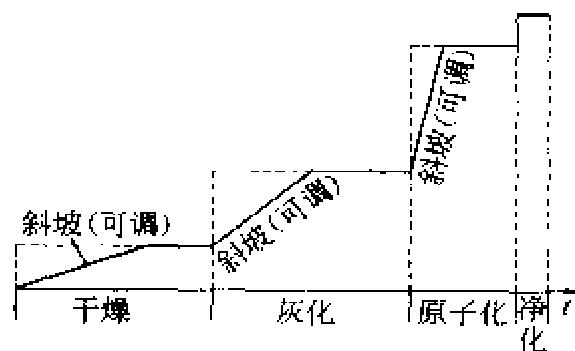
协作（协同）试验 cooperation test 协作试验系指实验室间为了一个特定的目的和按照预定的程序所进行的合作研究活动。协作试验可用于分析方法标准化、标准物浓度及含量定值、实验室间分析结果争议的仲裁和分析人员技术评定等项工作。

在分析方法标准化工作中，协作试验的目的是为了确定拟作为标准的分析方法在实际应用的条件下可以达到的精密度和准确度，制订实际应用中分析误差的允许界限，以作为方法选择、质量控制和分析结果仲裁的依据。

斜率 slope 直线与直角坐标系的 x 轴交角 α 的正切。在分析测试中，校正曲线的斜率表征了试验指标（响应值）随被测组分含量或浓度变化的速率，即灵敏度。

斜坡升温程序 ramped temperature program 高温石墨炉原子化器的一种升温程序，石墨炉温度随时间逐渐缓慢上升，其升温曲线呈斜坡形。如下页图。斜坡升温的优点是：在试样干燥阶段，溶剂逐步蒸发，可以避免温度突然升高引起的试液的飞溅；在灰化阶段，试样中的各种组分都能受到合适的加热，既能有效地除去基体，又由于基体蒸发或挥发过程比较平稳

不至于造成被测元素的挥发损失。



谐振腔 resonance cavity 在不同的学科中，有不同的含义。(1) ESR谐振腔：即ESR样品腔（不要与速调管本身的谐振腔相混）。常用的谐振腔有矩形的和圆柱形的。微波通过波导管进入谐振腔，在谐振时，由于微波在腔内多次反射，会产生振荡，并在腔内形成驻波。振荡的模式（即不同的驻波图形）视谐振腔的尺寸、形状等而定。因此谐振腔的命名和振荡的模式、谐振腔的尺寸、形状有关。一般大体分为两类，即横向电场（TE）型和横向磁场（TM）型。根据不同的测试需求，还可分为高压谐振腔、高温谐振腔、光照谐振腔、双模谐振腔、双样品谐振腔等。(2) 激光器谐振腔：谐振腔是激光器的重要组成部分。光学谐振腔由相隔一定距离的一对面对面放置的反射镜构成，激光介质就放在两反射镜之间。谐振腔的作用是提供光学正反馈并达到限制激光模式的目的。谐振腔常有平行平面反射镜腔、凹面反射镜腔和平面凹面反射镜腔等几种类型，可根据激光器对谐振腔的不同要求来选取。

谐振子模型 syntony model 双原子分子是简单的分子，其振动形式是很简单的，它只有一种振动形式，即伸缩振动。双原子分子的振动可以近似地看做为简谐振动，由经典力学的虎克定律可以推导出该体系的振动频率公式。

携出 carryover 是FIA常用术语之一，通俗地讲是指前一个样品对后一个样品测定值的影响。即相邻试样在通过分析流路时的相互混合部分（或称交叉干扰），与峰值的标准偏差 σ 相关。或称 $\sigma_{总}$（总标准偏差），它与注入条件、流动条件和检测条件有关。采样频率过高时，过多的携出会使所读出的峰值不可靠。最大采样频率 S_{max} 以下式表示

$$S_{max}=\frac{3600}{K\sigma_t}=\frac{60Q}{K\sigma_v}\ (次\cdot h^{-1})$$

式中，Q 为恒定流速；σ_t 代表时间标准偏差；σ_v 为体积标准偏差。$K=4$时携出尚在容许范围之内。

携出效应 shake-off effect 在XPS分析中，一种与携上效应相似的效应。不同的是携出效应受激发的电子被完全电离出去，留下的是带两个正电荷的离子，由于携出峰距主峰的能量间隔比携上峰的大而落在非弹性拖尾区内。此外，携出过程是从分离的能级向连续区跃迁，因此峰谱较宽。固体内的携出峰很少表现为分离的特性峰，而是和大量非弹性散射的电子混杂在一起，形成本底信号。

携上峰 shake-up peak XPS分析中由于携上效应而在主峰的高结合能

端出现的一个能量损失峰。参见携上效应条。

携上效应 shake-up effect 在 XPS 分析中，光电离发射一个光电子后，对于外层电子来说，相当于增加一个核电荷，由此引起的弛豫过程会使价电子产生重排。这当中的一种可能就是使部分价电子由原来占据的轨道向较高的、尚未被占据的轨道跃迁。这使得在检测结果中，主峰的高结合能端出现一个能量损失峰。这种现象叫做携上效应。

谢勒方程 Scherrer equation 1918 年谢勒（P. Scherrer）应用类似光学光栅衍射原理导出的计算微晶宽化效应的公式

$$D_{hkl}=\frac{k\lambda}{\beta_{hkl}\cos\theta}$$

式中，D_{hkl} 为反射面 hkl 法线方向上微晶颗粒的平均尺度；β_{hkl} 为衍射线 hkl 的宽度；λ 为入射 X 射线波长；θ 为相应的布拉格角；k 为比例常数，其大小与衍射线宽 β_{hkl} 的定义及微晶颗粒的形状有关，一般 k 值为0.89～1.15。此法所得结果与扫描电子显微镜观察所得的结果大致相等，但样品的制备和处理过程要简单得多。谢勒公式的适用范围为 3nm $<D_{hkl}<$ 200nm。不过，由于除了晶块尺寸使衍射峰变宽的因素之外，还同时存在着微观应力变宽和仪器因素的衍射线本征宽度，扣除不当，则会使误差偏大。

芯片电泳 microchip electrophoresis 在芯片上完成的电泳分离与检测方法的技术。

辛烷值 octane number 表征燃料在点燃式发动机中燃烧时的抗震性的指标，其大小与燃料组分的性质有关。一般说来，芳香烃的抗震性最大，环烷烃和异构烷烃次之，烯烷烃又次之，正构烷烃最小。将燃料样品与抗震性很大的异辛烷（辛烷值规定为 100）和抗震性很小的正庚烷（辛烷值规定为 0）配成的混合液在标准发动机中进行比较。抗震性与样品相等的混合液中所含异辛烷的百分数，即为该样品的辛烷值。汽油的辛烷值愈大，抗震性愈好，质量也愈高。在汽油中加入少量的抗震剂（如四乙基铅），可显著提高其辛烷值。

锌还原分光光度法 spectrosphotometric method with zinc reduction 也称锌还原法或差值法。本法用于测定各类土壤中的硝态氮，检测限为 0.05μg · g^{-1}、工作范围以 0.1～1.6μg · g^{-1} 为宜。样品用 100ml 1mol · L^{-1} NaCl 浸提剂浸提，在室温下［(25±5)℃］加塞振荡 30min，以浸提剂为参比溶液，在 210nm 处测吸收值，吸取 25ml 体积百分比为 10% H_2SO_4 溶液 2 份。在其中一瓶加 4 粒镀铜 Zn 粒（约0.15～0.2g），两瓶摇匀后放置过夜（约 14h）。在 210nm 处以已还原的溶液为参比液，测定未还原溶液吸光度值，工作曲线法获得未知样中硝态氮浓度。

锌指 zinc finger 是指转录因子与其特异的基因调控序列结合的一种

结构域。这个结构域由若干个串联的重复单元组成，每个重复单元则由一个以 Zn 原子与组氨酸、半胱氨酸络合而成的四角形结构为中心，连接若干其他氨基酸，形成状如手指的结构，与 DNA 序列结合，这种指状结构叫锌指。它具有很强的保守性。

不同种属的锌指中与 Zn 直接连接的氨基酸有的是一对组氨酸和一对半胱氨酸（CC—HH），有的是 CC—CC，也有的是 CC—CH 或 CH—CC，以前两者为多见。

在其他调控蛋白，如酵母 GAL4、哺乳类 sp-1、gap 类基因产物、性别相关因子、某些细胞因子（如神经生长因子等）等，也都含有锌指结构。

对于锌指结构，现已提出锌指、锌曲和锌簇 3 种模型，以解释其作用的多样性和特异性。

信背比 signal-to-background ratio; S/B 对某一谱峰而言，指背景以上该峰的最大计数和背景之比。是能谱仪的一个重要性能指标。

信号肽 signal peptide 在核糖体上合成蛋白质多肽链时，经常在 *N*-端合成一段肽，长约 15～30 个氨基酸，其中多数是疏水性残基，称为信号肽。信号肽是分泌性蛋白质 *N*-端的前导序列，它可引导蛋白质穿过内质网膜和细胞质膜的脂质双层，分泌于细胞外；然后信号肽被信号肽酶切除，生成功能性蛋白质，如胰岛素、抗体和消化道酶等。信号肽不存在于成熟蛋白质的 *N*-末端。它含有 4 个结构区，分别为 Ns、Hs、Cs1 和 Cs2，各有其特性和功能。Ns 这一小段通常带正电，可介于 -1～+5 之间。目前认为 Ns 的作用可能与信号序列受体（SSR）有关。Hs 区域是高度疏水的，倾向于形成 α 螺旋或短的 β 螺旋，这样有利于同脂双层的作用，促进新生肽链转运过膜。Hs 和信号序列识别颗粒（SRP）的结合有关。Cs1 是喜好肽酶复合物（SPC）的重要结合部位。

信息 information 广义上是指将试验数据、信号中所蕴含的意义，经过加工处理变为人们所接受的知识。从信息论的观点，信息是指对事物认识“不确定性”的减小。对于概率 $p=1$ 确定事件，肯定会发生，不确定性为 0，这种事件的发生不会给人们带来任何信息。事件发生的概率越小，人们对事件认识所包含的“不确定性”越大，发生这种事件所带来的信息越多。信息的多少可用信息量表示，信息量定义为事件出现概率 p 的倒数的对数

$$I = -\log_2 p$$

以 2 为对数底的信息量单位是比特。信息量具有统计特性。

信息大分子 informational macromolecules 指那些以特殊序列形式储存着生物学信息的生物大分子，例如很多蛋白质、脂质多糖和核酸等。

信息容量 information content 信息量的大小。信息量具有统计特性，通常不是考察某个单独事件出现的信息量，而是考察所研究对象所包含的

各个事件出现的平均信息量。在分析测试之前，对被测对象的认识是不确切的，这种验前“不确定性”用概率密度函数 $P_0(x)$ 表示，通常假定为均匀分布；得到测试结果之后，由于测试结果也是随机变量，具有不确定性，验后不确定性亦用一个概率密度函数 $P(x)$ 表示，根据误差理论，它为正态分布。通过试验所得的信息容量是

$$I_{(P,P_0)} = \int_{-\infty}^{\infty} P(x) \ln \frac{P(x)}{P_0(x)} dx$$

信噪比 signal-to-noise ratio; S/N 信号与测量噪声的比值。噪声干扰分析信号的检出，只有分析信号比噪声大到某一定程度时，才能可靠地检测分析信号，根据 IUPAC 的建议，将信噪比等于 3 确定为可靠检出分析信号的阈值。信噪比越高，越有利于信号的检测，在分析测试中，所获得的检出限就越好。

在电子能谱分析中，将信噪比定为光电子主峰信号和离主峰高动能端一定距离处的噪声之比。光电子的信号 S 由峰强度 P 减去本底信号 B 而得：$S = P - B$。一般规定离光电子主峰高动能端 7eV 处作为测量噪声的位置。信噪比是评价光电子能谱仪性能的重要指标之一。

在色谱分析中，噪信比是指噪声与灵敏度的比值。浓度型检测器的噪信比 N_s 按下式进行计算。

$$N_s = \frac{N}{S_v}$$

式中，N 为噪声；S_v 为灵敏度。N_s 的单位为 $mg \cdot ml^{-1}$、$ml \cdot ml^{-1}$ 或 $mmol \cdot ml^{-1}$。质量型检测器的噪信比按下式进行计算。

$$N_s = \frac{N}{S_t}$$

式中，S_t 为灵敏度；N_s 的单位为 $g \cdot s^{-1}$。

行波管放大器 travelling wave tube amplifier; TWTA 是靠连续调制由电子枪发射出的电子流的速度来实现放大功能的微波电子管。在行波管中，电子流同慢波电路中行进的微波场发生相互作用，电子流连续不断地把动能交给微波场，从而使微波功率得到放大。现代行波管已成为各种电子仪器的重要微波器件。在脉冲傅里叶变换电子自旋共振谱仪中，提供大功率微波脉冲的就是以脉冲方式工作的行波管放大器。

形成函数 formation function 又称为 Bjerrum 函数，络合物结合的配体浓度与络合物中心体（离子）浓度之比，其定义为

$$\bar{n} = \frac{c_L - [L]}{c_M}$$

式中，c_L 和 c_M 分别为配体和中心体的总浓度；[L] 代表游离配体的平衡浓度。形成函数 $\bar{n}$ 反映了络合物的络合程度。对单核均一配合物而言，它实际上是指中心离子的平均配位数（average ligand number）。通过一定的数学变换，$\bar{n}$ 可表征为以各级配合物累积稳定常数 β_i 和 [L] 表征的数学关系式，通过 $\bar{n}$-[L] 作图，可测定配合物的稳定常数 β_i（$i = 1$,

$2,\cdots,n)$。

形貌反差 topography contrast 在扫描电镜中，由于样品的形貌不同引起吸收电流像以及二次电子像上反差的不同。形貌反差是利用扫描电镜分析样品形貌的基础。

形态分析 species analysis 指确定某种成分在所研究系统中的具体存在形式及其分布。例如测定某化合物在不同物理状态（气态、液态和固态）或生物体中的分布形式。就元素分析而言，通常环境分析多数是测定其总量，在更深入的研究中，则需确定其活性形式即进行形态分析。如汞组成的污染物就有单质汞、甲基汞、乙基汞和Hg^{2+}等多种形态，通过对它们的分析，就可以了解其在气、液和固相及生物体内的分布情况，从而确定其污染或致毒的主要形式。

休哈特控制图 Shewhart's control chart 一种简便而行之有效的以预防异常情况发生为主的统计管理技术。1924年由美国休哈特（Shewhart）首先提出。它的本质是区分影响产品与工作质量的偶然因素与系统因素，如果只是偶然因素的影响、产品与工作质量处于统计控制状态，反之，如果产品与工作质量出现异常，表明存在系统因素的影响，生产和工作出现了或将要出现统计失控的情况。通过质量监控及时发现生产和分析测试过程中的异常情况及其有关的信息，为质量管理和决策提供依据。质量控制图最初用于工业产品的质量控制，20世纪40年代开始用于实验室质量控制和管理。

修饰电极 modified electrode 用功能性物质修饰电极表面而制成的功能电极。它显示出的催化、光电、电色、表面配合、富集和分离、开关和整流、立体有机合成、分子识别、掺杂和释放等效应和功能，使整个化学领域的发展显示出有吸引力的前景。

修饰双层磷脂膜 modified bilayer lipid membrane 由于双层磷脂膜具有高度的生物相容性，可将生物组分，如离子、核酸、酶、蛋白、抗原、抗体等掺入双层膜内，形成修饰双层磷脂膜。可用来研究这些组分的电化学特性以及对相应物质的响应特性。

修约规则 rules for rounding off 根据测量仪器和方法的误差与对测量数据精确度的要求，对实际测量数据的位数进行舍、入所依据的原则。现在采用“四舍六入五单双”的修约规则：有效数字后面的第一位为4，则舍去；若为6，则在前一位进1；若恰为5，而5之后的数字不全为0，则在5的前一位进1；若5之后全为0，且5之前的一位数字为奇数，则在5的前一位进1，5之前的一位数字为偶数，则舍去不计。所拟舍弃的数字为二位以上数字时，不得连续进行多次修约，应根据所拟舍弃数字中左边第一个数字的大小按修约规则一次完成数字修约。该修约规则的优点是保持了进舍项数平衡性与进舍误差的平衡性。

修正型俄歇参数 modified Auger

parameter 修正后的俄歇参数，它等于最强俄歇峰的动能加上同一元素最强光电子峰的结合能。是 XPS 分析中常用的一个参量，它与激发源的能量无关。

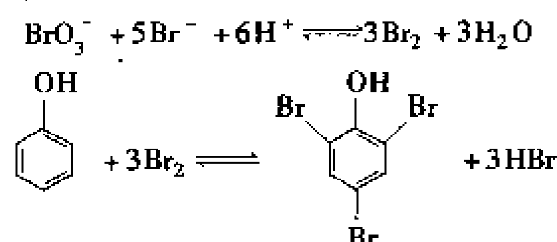
修正因数 correction factor 为消除或减少系统误差，对未修正的量值所乘的数值因数。因修正值含有不确定度，故经修正后所得到的量值仍含有不确定度。

修正值 correction values 为消除或减少系统误差，用代数法加到未修正的量值上的值，其值的大小等于已定系统误差，但符号相反。因修正值含有不确定度，故经修正后所得到的量值仍含有不确定度。

溴化钾粉末收集法 the method of KBr powder collection 一种在测量红外光谱时与气相色谱配套使用的微量样品的收集、转移技术。将气相色谱馏出的组分冷却收集在 KBr 粉末上，然后采用压片法测定红外光谱。其收集法为：取长约 20mm、内、外径与色谱馏出口管径相匹配的小玻璃管，管的一端套一个聚四氟乙烯小管，以便与色谱馏出管相连，小玻璃管内插入与管内径相当的一个实心玻璃棒，竖起玻璃管，把玻璃棒拔出一定距离，小心地在空出的玻璃管内装入研细的 KBr 粉，轻轻敲打管壁使管内粉末充实后，抽去实心玻璃棒，以细粉不掉为准，制成的 KBr 吸附管保存在干燥器内备用。

溴酸钾法 potassium bromate 一种以 $KBrO_3$ 为氧化剂的氧化还原滴定法。$KBrO_3$ 是一种强氧化剂，在酸性介质中，其半反应为：$BrO_3^- + 6H^+ + 6e \rightleftharpoons Br^- + 3H_2O$（$\varphi^\ominus = 1.44V$）。溴酸钾法常与碘量法配合使用，主要用于测定苯酚。在苯酚的酸性溶液中加入过量的含 KBr 的 $KBrO_3$ 标准溶液（可直接用 $KBrO_3$ 配制，或用碘量法标定），则发生如下反应

$$BrO_3^- + 5Br^- + 6H^+ \rightleftharpoons 3Br_2 + 3H_2O$$



过量的 Br_2 用 KI 还原，析出的 I_2 用 $Na_2S_2O_3$ 标准溶液滴定，由此可计算苯酚的含量。

溴值 bromine number 也称为溴价。是在规定条件下和 100g 试样起反应时所消耗的以克为单位的溴质量数（以 Br 计，用 $g \cdot g^{-1}$ 表示）。在石油产品中，溴值通常作为脂肪族不饱和度的一种量度，还可用于测算沸点到 315℃左右的石油馏分烯烃含量的百分比。溴值越高，不饱和烃含量就越多，油品的安定性也越差。

溴指数 bromine index 在规定的条件下与 100g 试样反应所消耗的以毫克为单位溴的质量数（以 Br 计，用 $mg \cdot g^{-1}$ 表示）。溴指数表明石油烃中能与溴反应的物质质量，也可以用于测算终馏点在 288℃以下的石油烃中的不饱和烃，评价轻馏分作为反应溶剂的适用性。

虚构场 fictitious field 对核自旋

体系施加一外加静磁场 $\boldsymbol{B}_0$（z 轴），同时在 x 轴施加一射频场 $\boldsymbol{B}_x = \boldsymbol{B}_1\cos\omega t$ 时，从实验室坐标来看体系的磁化矢量既要绕 z 轴作进动，又要绕 x 轴作进动，因此它的运动是很复杂的章动。但在 z' 轴以圆频率 ω 作顺时针自转的旋转坐标系来看，由于 x' 轴上体系受到的是固定射频场 $\boldsymbol{B}_1$ 的作用，而 z' 轴则受到 $\boldsymbol{B}_0 - \frac{\omega}{\gamma}$ 的固定场的作用，$-\frac{\omega}{\gamma}$ 项就是由于坐标旋转处理而“引起”的假想的磁场，因此称为虚构场或虚设场，这里 γ 是核的磁旋比。这样在旋转坐标系中体系实际承受了有效场 $\boldsymbol{B}_{eff}$ 的作用，它由上述的这两个固定磁场的矢量和构成

$$\boldsymbol{B}_{eff} = \left(B_0 - \frac{\omega}{\gamma}\right)\boldsymbol{k} + B_1\boldsymbol{i}$$

式中，$\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{k}$ 为坐标系基矢量。因此从旋转坐标系来看（$\gamma > 0$ 核为左旋坐标系），体系的磁化矢量只受到一个固定的 $\boldsymbol{B}_{eff}$ 的作用并绕着 $\boldsymbol{B}_{eff}$ 作进动。

虚假谱带 spurious bands 在鉴别样品时，红外光谱中出现的一些不属于样品本身的吸收谱带。这种现象可能是由于杂质的引入、操作的不当或仪器质量问题而引起的。例如 3400 cm^{-1} 出现的较宽吸收谱带，1650 cm^{-1} 出现的吸收，可能是样品中含有水分或溴化钾压片吸水所致。2350cm^{-1} 较弱的吸收是由于大气中的二氧化碳所引起。787 cm^{-1} 来源于吸收池内残留的四氯化碳。

序参数 order parameter 在研究液晶及生物膜等的结构和动态性质时，可使用由氮氧自由基标记的脂肪酸等化合物。这些化合物较大，且具有细长结构，在液晶及生物膜中的运动不是各向同性的，而是围绕分子长轴的运动较围绕其他轴的运动更容易。如果氮氧自由基有绕 z 轴的快速旋转运动，则 x，y 成分的超精细耦合作用的各向异性将被平均化，而 z 成分的值不发生变化。这时可定义序参数 S 为

$$S = \frac{\overline{A}_{/\!/} - \overline{A}_{\perp}}{A_{zz} - \frac{1}{2}\left(A_{xx} - A_{yy}\right)}$$

式中，$\overline{A}_{/\!/}$ 和 $\overline{A}_{\perp}$ 是超精细耦合常数平行分量和垂直分量的实测值；而 A_{xx}，A_{yy}，A_{zz} 是已知单晶样品超精细耦合张量的主值。序参数 S 是分子运动的各向异性或无规程度的量度，也反映了膜的流动性。S 值的大小在 0 与 1 之间。对完全混乱的快速运动，$S = 0$。

序贯抽样检验 sequential sampling inspection 事先不规定样本的大小，每次只从产品中抽检一个单位产品，在每抽检一个单位产品之后，根据已抽检的单位产品的检验结果，适时地做出继续抽检或终止抽检的判断。它的优点是在抽检单位产品数尽可能少的条件下，仍能满足对两种错判概率的限制，既限制将合格产品判为不合格产品的概率，又限制将不合格产品判为合格产品的概率。特别适用于破坏性检验、武器检验、医学试验及其

他费用高的检验。

悬浮液进样 slurry sampling 以固体悬浮液形式将试样引入原子化器。根据样品性质的不同，使用或不使用悬浮剂（如琼脂、乳化剂 OP、三乙醇胺等），将固体粉状样品制成稳定的悬浮液，用移液管手动进样到石墨炉，或者，喷雾进样到化学火焰等离子体炬焰中。它是目前广泛使用的一种固体进样方式，已成功地用于电感耦合等离子体原子发射光谱分析和原子吸收光谱分析，用来测定矿物矿石、土壤、煤飞灰、小麦、米粉、猪肝等各种地质、环境、农作物、生物试样中微量元素的测定。

旋光度 rotatory power 对于具有光学活性的分子，当平面偏振光通过它时，偏振面便发生旋转，即该物质具有旋光性（与磁致旋光相区别，这种旋光称为自然旋光）。根据偏振面所旋转的方向不同可分为左旋（通常用 *l* 或 - 表示）物质或右旋（通常用 *d* 或 + 表示）物质，偏振面所旋转的角度称之为旋光度，可用旋转检偏镜进行检测。参看**比旋光度**条。

旋光色散 optical rotary dispersion 对于特定的旋光介质，不同波长的偏振入射光在相同的光行程长度后其偏振面的旋转角度不相同。这说明，旋光介质的旋光程度是波长的函数，这种现象被称为旋光色散。参见**旋光性**条。

旋光性 optical activity 有些各向异性的晶体（例如石英晶体），会使入射偏振光的偏振面发生旋转，即一束平面偏振光即使沿着晶体的光轴行进，其偏振面会被转动一个角度（转动角度大小与光在该晶体中经过的光程成正比）。这种使平面偏振光偏振面旋转的性质叫物质的旋光性。按偏振面向哪个方向旋转，还有左旋晶体、右旋晶体之分。除了石英晶体以外，不少有机液体也有旋光性，例如葡萄糖液是右旋的，果糖溶液则是左旋的，天然石英晶体既有右旋的、也有左旋的。

旋进照相法 precession photography 记录和测定晶体衍射效应的照相方法。实验装置由提供特征 X 射线（波长为 λ）的光源、样品台、只让某一层衍射通过而挡住其余各层衍射的环状层线屏和平面 X 射线感光板所组成。在曝光过程中，需要曝光的倒易点阵面与平面感光板始终保持平行，而且通过倒易点阵原点的入射 X 射线轴线作旋进运动，使该倒易点阵面上距原点距离小于$(2\sin\varphi)/\lambda$（φ 是倒易点阵面法线与 X 射线轴线之间的夹角）的点阵点有机会扫过反射球面而满足衍射条件。旋进照相法可以收集到无畸变的、放大的、低角度的倒易点阵点分布图像，目前主要在正式收集衍射强度数据之前，用于研究蛋白质晶体的晶胞参数、对称性、空间群等晶体学数据，以及了解晶体质量等情况。

旋转边带 spinning side-bands 样品在非均匀磁场中旋转时，感受到的磁场随着旋转位置不同而呈周期变

化，其效果恰似在平均场下的静止样品受到一个调制磁场的作用。由于调制效应产生调制边带，因此样品旋转也就产生了一系列边带，称为旋转边带。旋转边带对称于样品的谱峰在其左右两侧出现，相邻边带信号之间距离等于样品旋转速率，因此改变旋转速率便可容易判断它们是旋转边带，而不是谱峰。边带信号的幅度依赖于场不均匀性的大小，为使边带信号强度下降到可忽略程度，必须仔细匀场。

旋转薄层法 rotating thin layer chromatography 又称离心薄层法（centrifugal TLC）。是在薄层、离心纸色谱及柱色谱等基础上发展起来的一种离心型连续洗脱的环形薄层色谱分离技术，旋转薄层的分离原理除根据样品在固定相和流动相之间的吸附、分配作用的不同外，再加上离心加速的作用，使样品中的各组分之间原有的 R_f 值差异加大，从而提高了分离效果，加速了分离速度。由于仪器结构简单、操作方便、分离效果好等优点，已广泛应用于合成和天然产物的制备分离。

旋转倒反轴 rotary inversion axis 进行旋转倒反对称操作的对称元素，简称反轴。对称图形中某一独立部分绕直线旋转基转角 α 后，再经对此直线上的一个假想点实施倒反操作后，才与对称图形中另一对称等效的独立部分重合。这一复合对称操作称为旋转倒反对称操作，此直线称为旋转倒反轴，上述假想点应作为晶体坐标系的原点。在几何晶体学中，只有四次反轴是一个新的对称元素，它的国际符号为 $\bar{4}$。

旋转环·盘电极法 rotating ring · disk electrodes 在盘电极的周围加上一圈环电极，旋转时溶液从盘到环的方向对流。分别设定环与盘的电位后可在环电极上将盘电极上的生成物检出的方法。它是研究电极反应机理的很有效的实验手段，已用于医学中的牙科领域，光谱电化学分析，生物发酵反应，微量成分的定性、定量分析，半导体电极反应中的光电极反应，金属或合金溶解、钝化反应，络合物的电极反应，有机电解，催化反应以及无机化合物的电解。

旋转平台电极 rotating platform electrode 一种原子发射光谱仪的液体进样电极。旋转平台电极材料可以采用铜、石墨或其他合适的金属，加工成直径为 10～20mm，厚 3～5mm 的圆盘，由小型电动机带动，以每秒 4～60 转的可变转速绕水平轴转动，溶液注入在液槽中，圆盘下部浸入样品溶液中。上电极为与圆盘材料相同的棒状电极，并与圆盘保持一定的间隔。当圆盘旋转时，能不停将样品溶液很好地引入分析间隙，通常采用火花光源。这种电极表面的溶液，总是不断更新，所以有较好的精密度。

旋转扇形板 rotating sector disk 它是在一块圆形旋片的圆周上切出若干个扇形缺口，切口的角度按几何级数改变，切口的高度按等差级数改变。例如，切口角度可取圆周的1/2，

1/4，1/8，1/16，1/32，1/64 等，切口高度可取 0.2，0.4，0.6，0.8，1.0，1.2mm 等。由于旋转时各阶遮挡光束的时间不同，狭缝高度各段的通光时间就与各切口的弧长成正比，因而谱线获得不同程度的减弱。扇形板要尽量靠近狭缝安装，转速要较大（>1200r·min^{-1}），这样才能消除光的衍射和互易律失效引起的影响。另外，最好采用稳定的直流弧光照明，否则必须防止断续效应引起的影。

旋转扇形板法 method of rotating sector disk 阶梯减光板对不同波长的光的透过率是不同的，就是对同一波长的光的透过率也会随时间的推移而发生变化。旋转扇形板能克服上述缺点。利用扇形板不同切口通过相同强度光的时间不同而改变曝光量，测量相应于不同切口高度的谱线黑度 S 作为纵坐标，以扇形板不同切口相应的相对曝光时间 t 为横坐标，绘制乳剂特性曲线。

旋转小室逆流色谱 rotational little-chamber counter-current chromatography; RLCC 用中心有一小孔的聚四氟乙烯圆盘将分离柱管分隔成若干连通的小空间，再将若干根这样的柱管排列在圆形转盘架上，柱管之间用聚四氟乙烯管串联起来。溶剂通过旋转密封接头进出这组分离柱管。所有柱管以一定的转速和倾角绕转盘中心轴转动。流动相进入第一个小室后，就会取代其中原已注满的固定相的位置，直到流动相液面达到圆盘上小孔的水平时，流动相就会穿过小孔进入下一个小室，并依次从一根柱管进入另一根柱管。随着流动相逐步穿过各个小室，带动样品在各个小室的两相间分配。柱管的转动是为了加速两相间的交换和接触。参见**逆流色谱法**条。

旋转阳极 X 射线光源 rotating anode X-ray source 一种可拆卸式的 X 射线管。由于 X 射管的功率绝大部分消耗在阳极材料的发热上，即使用循环冷却系统，靶面的冷却能力也有一定的限制，所以使用固定靶的封闭 X 射线管的功率一般在 500～3000W 之间。在旋转阳极 X 射线管中，采用旋转阳极技术，使得靶面上受电子轰击的部分不断地变更，不会因局部过热而熔化，这种 X 射线管的功率最高可达到 100kW。

旋转轴 rotation axis 进行绕轴旋转对称操作的对称元素。设有一几何直线通过对称图形，以对称图形中任意一点为初始点，绕此直线旋转一个 α 角度（称为基转角）之后，与另一点重合，此点与初始点的性质完全相同。而且上述操作经过 n 次之后，回复到原来的初始点。这样的几何直线称为 n 次旋转轴，或叫 n 重旋转轴。在几何晶体学中只存在 1、2、3、4、6 次旋转轴，它们的基转角分别是 360°、180°、120°、90°和 60°。这些旋转轴的国际符号分别是 1、2、3、4、6。

旋转坐标系 laboratory frame of reference 描述任何物理过程的时空关系习惯上通常用笛卡尔坐标，也称为

实验室坐标（参照）系，质粒的空间坐标用 x，y，z 三个相互垂直的静止的坐标轴上的位置来表示。对于一个复杂的运动体系为了简化描述起见，引入各种坐标系。在 NMR 中通常引入旋转坐标系，其空间的3个坐标轴仍相互垂直，记以 x'、y'、z'。与前者不同处是3轴皆作旋转运动，而 z' 轴与 z 轴完全叠合，但以圆频率为 $\omega_0=\gamma B_0$ 的速度作自转，所研究的核的磁旋比 γ 为正时，顺时针方向运动；γ 为负时，逆时针方向运动。因此 x'，y' 轴或 $x'y'$ 平面随之作相应的旋转，在讨论体系的宏观磁化强度矢量的变化时几乎都在此旋转坐标系下进行。对于一个沿着 x 轴所施加的射频场 $B_x=B_1\cos\omega t$，若在 z' 轴，以与其相同圆频率 ω 旋转的旋转坐标系看，它的强度不再以余弦函数变化，而是恒定的 B_1，即在 x' 轴上有一固定的 B_1 的作用，因此可以大大简化数学处理，并且简化物理解释图像或模型。

旋转坐标系中的自旋-晶格弛豫时间 spin-lattice relaxation time in rotation reference；$T_{1\rho}$ 见自旋锁定条。

旋转坐标系中二维核欧沃豪斯效应谱 two dimensional nuclear Overhauser effect spectroscopy in rotating frame；ROESY 脉冲序列为 90°—t_1—自旋锁定脉冲-采集 FID(t_2) 与二维核欧沃豪斯效应谱(NOESY)之区别在于它是利用体系在自旋锁定期间使锁定在 y' 轴上的磁化矢量发生交叉弛豫的现象，因而称为旋转坐标中的核欧沃豪斯效应(NOE)谱。由于其相关峰不会出现强度为零的情况，因此克服了因通常 NOE 可能出现零增益而在 NOESY 谱中丢失谱峰的缺点。

选控质控图 selective control chart for quality 简称选控图。是我国学者张公绪在休哈特控制图的基础上提出的一种改进质控图。休哈特控制图是全控制，只能控制产品的总质量，不能控制产品的工序质量。选控图在休哈特将影响产品质量的因素区分为随机因素与系统因素（又称异常因素）的基础上，进一步将系统因素区分为欲控系统因素和非控系统因素，找出产品的特性量值与非控系统因素之间的关系，建立两种类型的控制图，分别显示欲控与非控系统因素对产品质量的影响，根据控制图的诊断理论实现对产品总质量和工序质量的分别控制。参见**休哈特控制图**条。

选区电子衍射 selected area diffraction 有选择的对样品某个微区进行衍射来获得该微区的晶体学信息的分析手段。在成像方式时，推入位于物镜像面上的选区光阑，对样品欲产生衍射的微区进行选择并限制其大小，精确调节光阑面与物镜像面重合，而后转到衍射方式，拉出物镜光阑，在荧光屏上即可获得反映样品微区晶体学特征的电子衍射花样。由于物镜的球差和图像聚集误差的影响，使得选区尺寸受到限制。对于高分辨率透射电镜，最小选区直径约为 1μm。采用微衍射的方法，束斑直径

可以降到100nm以下。

选择定则 selection rule 电子由高能级轨道向低能级轨道的空位跃迁，并发射特征X射线时，应遵循的规则。根据量子力学原理和实验规律，跃迁电子的始态量子数和终态量子数之间必须满足一定的条件，即"选择定则"，满足选择定则所产生的谱线被称为"图表线"。在X射线光谱学中，最强的一组图表线为"电偶极线"，其选择定则为

$$\left.\begin{array}{l}\Delta n \neq 0 \\ \Delta l = \pm 1 \\ \Delta J = 0, \ \pm 1\end{array}\right\}$$

n 为主量子数；l 为角量子数；J 为内量子数，其数值为 $J = | l \pm m_s |$，m_s 为电子自旋量子数。

选择阀 selection valve 是双层结构，在转子上有一个公共通道，在定子上有6~10个等距离分布的选择孔道，当转子转到适当位置时即与所需要的选择孔道接通。选择孔道分别与若干个样品、试剂、标准液、流通池及废液瓶等连接。公共通道的外端则通过储存管与注射泵相连。选择阀必须受微机控制方能用于顺序注射分析系统。在手工操作条件下只能用于选择性采液。

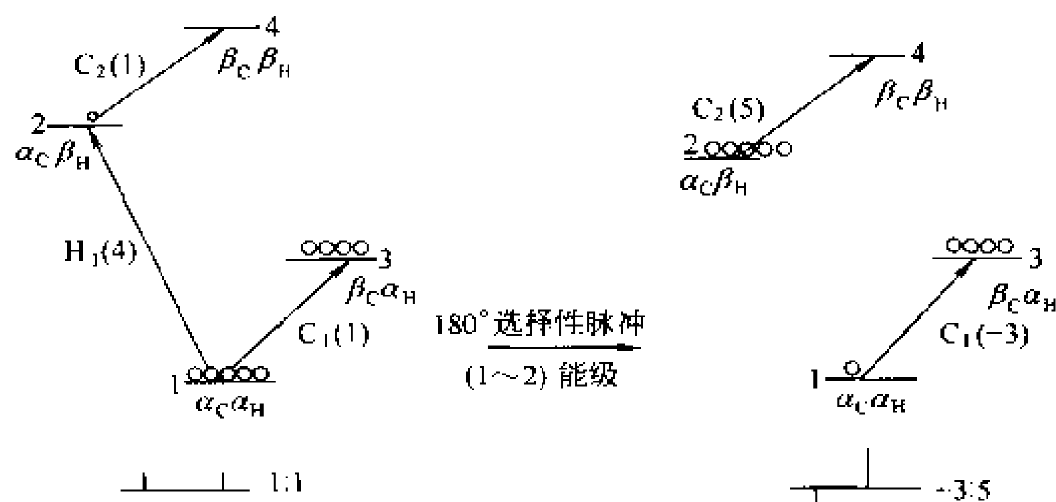
选择反应监测 selected reaction monitoring; SRM 是GC-MS/MS或LC-MS/MS等联用技术的一种检测方式。对于复杂混合物可直接或只进行简单前处理即可进行定量分析。连续检测由 MS_1 选择的特定质量的先驱离子产生的特定质量的子离子。当存在与待测化合物具有相同保留时间甚至相同质量离子的杂质时，根据是否出现与待检物相同质量的子离子，就可判断、排除杂质的干扰。与MS选择离子监测（SIM）相比，SRM的选择性更强，由于减少了化学噪声，用于定量分析比SIM的检测灵敏度更高。

选择离子监测 selected ion monitoring; SIM 又称选择离子检测（selected ion detection）。是质谱法常用的一种扫描方式。预先选定若干个能表征某目标化合物的特征离子，质量分析器进行跳跃式扫描，此时只向检测器传输选定的离子信号。用选择离子监测方式可以有效地消除非目标化合物离子的干扰，且因只检测选定的离子，从而增加了这些检测离子的驻流时间，与全扫描检测所有离子相比，大大提高了检测灵敏度，适用于痕量分析。

选择性布居数反转 selective population inversion; SPI 当用选择性脉冲（180°脉冲）施加在某特定谱线上，则与此谱线相关的两个核自旋能级上粒子布居数发生反转或翻转，称为选择性布居数反转。

选择性腐蚀 selective corrosion 某些组分以高出其在合金中所占的比例优先溶解的腐蚀。

选择性极化转移 selective polarization transfer; SPT SPT实验的脉冲序列是：π（^1H 选择性辐照）-$\frac{\pi}{2}$（^{13}C）-采集关于 ^{13}C 的自由感应衰减



(FID)。以 AX 体系的 CH 双核自旋系统的 SPT 实验为例。当选择性的 π 脉冲作用于 H_1 跃迁，使与该跃迁所涉及的两能级上的粒子数反转。原来热平衡时 ^{13}C 的双线 C_1 与 C_2 强度均为 1。现在则分别为 +5 和 -3，平均增强因子为 $\frac{\gamma_H}{\gamma_C}=4$。可见选择性的脉冲作用于与丰核相关的跃迁，产生粒子的抽运，这种极化作用转移到（传递给）了低丰度、低 γ 值的不灵敏核，使其信号产生增强的效果。利用选择性脉冲作粒子的抽运，导致极化转移，可增强低丰度、低 γ 值的核的灵敏度。

选择性检测器 selective detector 只对某类溶质或含有该类溶质的柱流出物有响应，而对其他物质无响应或响应很小的检测器。常用的选择性检测器有紫外-可见光检测器、电导检测器、荧光检测器、化学发光检测器、安培检测器和光散射检测器等等。

选择性脉冲激发 selective pulse for excitation 只对一条谱线（单一频率）或一些谱线（多个频率或某些频率窄区）进行激发而其余谱线皆不激发，常常使用场强 $\boldsymbol{B}_1$ 较弱的射频场来实现。这种脉冲常称为弱脉冲或软脉冲。选择性脉冲按所影响频域范围可分为 3 类：(1) 不同核的选择性脉冲，只激发同种核，而不激发其他核。射频场的频率范围 $\frac{\gamma \boldsymbol{B}_1}{2\pi}$ 应大于被测核的化学位移范围，而小于与其他核间共振频率之差。(2) 多重峰选择性脉冲：只激发自旋耦合裂分的某个多重峰的频率范围，而其余多重峰谱线皆不激发。$\frac{\gamma \boldsymbol{B}_1}{2\pi}$ 应满足大于自旋耦合常数 $|J|$ 而小于谱峰的化学位移之差。(3) 线选择脉冲：只激发多重峰中某一共振线，而其余不被激发。$\frac{\gamma \boldsymbol{B}_1}{2\pi}$ 应满足大于被激发的某谱线的半高宽 $\Delta\nu_{\frac{1}{2}}$，小于多重峰间的 J。

选择性去耦 selective decoupling 只对某个质子谱线进行干扰，保留了其他质子对核的耦合，以观测该核耦

合信息的去耦方式。选择性去耦可以是选择一个频率，恰好是某个质子的共振频率，连续作用于试样，所以也称单频率连续波去耦。根据去耦场强的大小，可分为核选择性去耦（实际上指异核的全去耦），多重峰选择性去耦和线选择性去耦。设去耦场强为 $\boldsymbol{B}_2$，不同核之间的共振频率差为 $\Delta\Omega$，耦合核的化学位移为 δ，耦合常数为 J，观测核的线宽是 $\Delta\nu_{\frac{1}{2}}$，则它们的去耦条件分别为

核选择去耦：

$$|\Delta\Omega| > \left|\frac{\gamma \boldsymbol{B}_2}{2\pi}\right| > |\delta|$$

多重选择性去耦：

$$|\delta| > \left|\frac{\gamma \boldsymbol{B}_2}{2\pi}\right| > |J|$$

线选择性去耦：

$$|J| > \left|\frac{\gamma \boldsymbol{B}_2}{2\pi}\right| > \Delta\nu_{\frac{1}{2}}$$

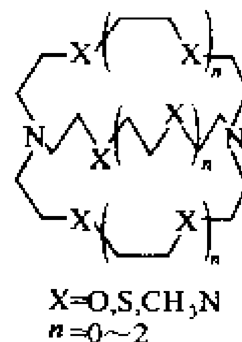
通常所说的选择性去耦是指异核多重峰选择性去耦。参见**宽带去耦**条。

选择性系数 selectivity coefficient 对于离子选择性电极，当试液中除电极的主要响应离子 i 外，其他共存离子可能影响电势值。其影响程度可由扩充的能斯特公式描述

$$E = E^{\ominus} \pm 2.303\frac{RT}{z_i F}\lg[a_i + \sum_j K_{ij}^{pot} a_j^{\frac{z_i}{z_j}}]$$

式中，a_i 和 a_j 分别为主要离子和干扰离子的活度；$\sum_j$ 为共存的所有干扰离子之和；z_i 和 z_j 分别为主要离子和干扰离子的电荷数；K_{ij}^{pot} 称为离子 i 对离子 j 的电势选择性系数，或简称选择性系数。K_{ij}^{pot} 大，共存离子 j 的干扰大，K_{ij}^{pot} 小，则其干扰较小，一只优良的离子 i 的选择性电极，选择性系数越小越好。

穴醚 cryptand 是一种 N 原子位于桥头的双环式多座配体。可以将金属离子包在其中形成主客体络合物。借用希腊语中的“隐藏（crypto）”一词而命名。如下图，配位原子除 N 外，还可以是 O、S 等，配位原子数为5～11个。能与碱金属离子等难以配位的离子形成稳定的络合物。金属离子的半径、络合物是否扭曲等对络合物的稳定性影响很大。如[2,2,2]－K^+穴醚络合物的稳定性是 18-冠-6-K^+络合物稳定性的 10^4 倍。络合物易溶于有机溶剂。穴醚多用作金属离子的掩蔽剂、在有机相中引入求核性、求电子性试剂等。



X=O,S,CH_3,N
n=0～2

血红蛋白 haemoglobin 从动物血浆中分离出来的一种能运载氧的含铁蛋白。分子量约为 64000。其分子为一个四聚体，由两条相同的链通过非共价键连接聚集而成。

血库质量控制 quality control of blood bank 是科学地考评工作人员是否严格遵守操作规程，确保血液（制品）质量和输血安全的必要措施，包括：（1）全血及其制品，如血浆、浓

缩红细胞等，需符合要求；（2）各种试剂，如抗体血清、保存液等，应鉴定合格；（3）主要仪器设备，如储血电冰箱、低温冰柜、恒温水浴箱、离心机等，均应符合要求。

血块收缩试验 clot retraction test; CRT 血液完全凝固后，由于血小板释放血栓收缩蛋白使纤维蛋白网发生收缩，使血清析出、凝血块退缩。血块收缩的好坏，取决于血小板的量、质和纤维蛋白原的浓度。通过观察血液凝固后血块的收缩，可间接了解体内血小板和纤维蛋白原的情况。

血凝抑制 hemagglutination inhibition 血凝现象可被相应抗体所抑制而不出现血凝，称为血凝抑制。这是因为抗体与病毒结合后，阻止了病毒表面的血凝素再与红细胞上的受体发生结合所致。

血凝作用 hemagglutination 许多裸露的或带有包膜的病毒能凝集某些动物（鸡、豚鼠、猴等）的红细胞，这是由于病毒的衣壳或包膜蛋白与红细胞上的相应受体结合，使红细胞发生凝集，称为血凝作用。如正黏病毒表面的血凝素使鸡红细胞发生凝集，可用于病毒的鉴定和含量的测定。

血清 serum 血液凝固后析出来的清亮、黄色液体成分。与血浆的不同之处是已除去了纤维蛋白原。

血清胆碱酯酶 serum cholines terase; SchE 由肝脏和腺体合成，故存在于血清和腺体中。SchE 水平的降低常见于肝细胞损害。急性有机磷农药中毒时，SchE 和全血胆碱酯酶都降低，常以后者的降低作为诊断依据。

血清溶菌酶测定 determination of serum lysozyme 正常人血清中的溶菌酶主要来自粒细胞的裂解，单核细胞虽富含此酶，但细胞数量很少。利用血清对微球菌悬液的溶解程度可测定血清中此酶的活性。在粒细胞破坏过多所致的（如免疫性）粒细胞减少症此酶活性增高，再生低下性粒细胞减少症则降低；在急性单核细胞或粒-单核细胞白血病血清溶菌酶活性显著增高，有助于鉴别诊断。

血清铁蛋白测定 ferritin assay 早期缺铁的重要选择试验，较血清铁的变化更早。血浆中铁蛋白浓度与储存铁量成正比，故缺铁时铁蛋白减少，常低于 $16\mu g \cdot L^{-1}$。血清铁蛋白升高见于炎症、肿瘤（尤其是白血病）、肝细胞坏死等。

血清运铁蛋白饱和度 transferritin saturation; *TS* 血清运铁蛋白的合成增加，使血清总铁结合力增高；血清运铁蛋白的丢失，使血清总铁结合力降低。血清运铁蛋白饱和度是按下式计算

$$TS = \frac{\text{血清铁}}{\text{血清总铁结合力}} \times 100\%$$

正常参考值为 20% ~55%。*TS* 降低（<15%）结合病史可诊断缺铁；*TS* 升高见于血色病、过量铁摄入等。

血细胞计数仪 cytometer; blood cell counter 指电子血细胞计数仪。可快速计数血液中红细胞、白细胞、

血小板。根据其工作原理可分为光电型、电容型、电阻型和激光型，其中电阻型最常用。

血小板寿命测定 determination of platelet life span; PLS 血小板由生存至消亡的时间称为血小板寿命。正常参考值随方法学不同各有差异，^{51}Cr 或 ^{111}In 法为 8～11d；丙二醛（MDA）法为 7～15d，血栓素 B2（TXB2）为 7～11d。PLS 反映血小板生成与破坏之间动态平衡的关系。

血型 blood group 指血液成分的遗传多态性。是人体各种细胞（红细胞、白细胞、血小板、各种组织细胞）和各种体液成分的抗原性差异的基础。血型在现代医学中具有重要的地位，应用于输血前的血型配合、器官移植前的组织配型、新生儿免疫性疾病和早期新生儿溶血病的检查、亲子关系鉴定，以及法医学、人类学的研究等。

血型基因 blood group gene 控制血型遗传的因子。

血型凝集抑制试验 blood type agglutination inhibition test 间接证明红细胞抗原的试验方法。当红细胞加入标准血清后，若有相应抗原，便与血清中的抗体结合。将结合后的血清再用相应细胞（如抗 A 血清被结合后，用 A 型细胞检查）测定效价，并与结合前血清效价比较。当血清效价显著下降或不凝集相应红细胞时，便可证明受检细胞含有此抗原，从而间接推测受检细胞的血型。

血型物质 blood group substance 组织细胞及体液中存在的、由多糖和多肽组成的、具有同族特异性的血型抗原物质。唾液中血型物质的测定对 ABO 亚型的判断、抗体性质的鉴别以及法医学血型鉴定具有重要的意义。

血型自动分析仪鉴定 blood type autogrouper 目前已有多种鉴定血型的自动分析仪。有的多通道仪器可以用一份少量标本同时检测 ABO、Rh 等血型和梅毒血清试验等 10～15 个参数。吸取标本稀释、加试剂、保温、判定及打印结果全部自动化。有的仪器能进行酶处理或加入聚乙酰吡咯烷酮；有的仪器通过机振动或离心增加反应。鉴定结果可永久保存，每小时可测标本 50～360 份。

血药浓度 plasma drug concentration 药物进入机体后借助血液到达作用部位或受体部位，大部分药物药理效应的强弱与细胞外液中的药物浓度成正比，而后者又与血浆中的药物浓度相平衡。所以，测定血浆中的药物浓度可间接地作为受体部位药物浓度的指标。

寻优 optimization 又称优化。是通过科学的试验设计与精心的试验，使试验条件和结果达到最优。在分析测试中，常用的优化方法有正交试验设计，单纯形优化法，黄金分割法，梯度寻优，模拟退火法等。

循环伏安法 cyclic voltammetry; CV 是以线性扫描伏安法的电位扫描到头后，再回过头来扫描到原来的起始电位值，所得的电流-电压曲线为基础的分析方法。该法完成一次扫描可

同时得到氧化过程和还原过程的信息，可用于研究电活性物的电极反应机理，研究双电层、吸附现象和电极反应动力学。

循环色谱法　recycling chromatography　通过多通切换阀将柱流出物全部或需要进一步分离的部分重新导入分离柱，在柱内循环分离的色谱技术。循环色谱法在不增加柱长和使用低效高容量填料的情况下可以获得较高的分离效率。循环色谱主要用于液相色谱制备，循环分离的效率和分离度决定于连续再循环的次数。

Y

压电 DNA 传感器　piezo-electric DNA sensor　在传感器的压电晶体上用适当方法固定单链 DNA（ssDNA）或具有特异性序列的寡聚核苷酸片段（称探针分子），根据碱基序列配对互补原理，压电敏感元件上的探针分子与试液中的目标 ssDNA（称靶 DNA）分子间互补杂交，引起传感器振荡频率及阻抗等参数发生变化，由此实现 DNA 检测的传感器。它可用于研究染料分子与 DNA 分子之间的嵌入作用，或抗癌药物与 DNA 的相互作用。

压电光谱电化学　piezo-electric spectroelectrochemistry　又称光-声-电多维联用传感技术。是将光谱电化学和压电石英晶体传感检测有机地结合起来，可同时获取来自光谱、压电及现代电化学的多维、动态或实时的信息的技术。现在，压电光谱电化学技术主要提供以下信息：电极电位与电流、参与反应的物质的吸光度以及电极表面沉积膜的质量变化，溶液本体与晶体电极界面上所发生化学反应过程中涉及的电量等电学信息；与红外、紫外或拉曼光谱等有关的光谱学信息；以及压电晶体的多种频率、等效阻抗/导纳、相位、质量因子等压电学信息；或与表面声波传感器件有关的诸种频率、频谱信息，从而对界面化学过程提供全面的描述。

压电化学 piezo-electric chemistry 利用以压电材料为基底的体声波器件在厚度剪切模式振荡过程中与周边环境的相互作用，由器件超高频声波的声电阻抗谱、频谱或相位等参量变化，对环境介质包括质量、黏弹性、导纳、介电或流变特性、离子溶剂传输等物理、化学性能做出相关应答并转换为相应传感检测信号，获取有关组分或多元组分体系的成分、性状的一维或多维信息，以求得对象的全面、动态、实时或在位描述的传感检测的技术。需样量可小至微克（μg）或微升（μl）级。可用于气相传感检测，液相、液/固界面或固相表面的研究；测定低到纳克（ng）级质量或 $pmol \cdot L^{-1} \sim nmol \cdot L^{-1}$ 级的痕量组分；用于实时或在位检测；可用作流动注射分析和液相或气相色谱中微量样品组分的灵敏检测器。除了各种无机物和有机物的痕量或微量分析之外，它也可用于药物、食品、冶金样品、酶、微生物、免疫体系、环境污染物、血液组分和血液流变特性以及其他临床医学检测。

压电晶体 piezoelectric crystal 某些晶体介质在外来应力的作用下所产生的极化强度的大小与应力成正比，具有此种效应的晶体称为压电晶体。

压电酶传感器 piezo-electric enzyme sensor 由酶膜和压电敏感元件密切接触构成的压电传感器。主要用于测定样液中的底物或酶反应产物，也可用以测定酶的活性。

压电免疫传感器 piezo-electric immunosensor 利用抗体（或抗原）对抗原（或抗体）的特异性识别功能和压电晶体的高灵敏质量响应而制成的压电传感器。通常是将抗体或抗原分子固定于压电晶体（如石英晶体）表面，当其与底物分子发生识别反应时将引起晶体表面质量的改变，根据晶体振荡相应频率的改变，可以灵敏地监测底物分子的浓度。用于测定抗体和抗原。

压电微生物传感器 piezo-electric microbe sensor 在压电石英晶体表面交联固载待测微生物的相应抗体，通过抗体与微生物的特异性结合，导致晶体质量负载增加，使谐振频率发生变化，从而可对微生物进行检测的压电传感器。

压电转换器 piezoelectric transducer 根据压电晶体的压电特性可以制成压电传感器。压电传感器通常是由压电晶体与其特定的振荡回路和频率计数器组成。

压力保护 pressure protect 在色谱分析过程中，为防止因流路堵塞等原因使工作压力超出色谱柱和仪器的正常使用压力而采取的保护措施。通常是预先设定一个压力上限或下限，当工作压力超过或低于此设定压力限值时，压力传感器将信息反馈到控制单元，仪器自动停止输液泵工作，以保护色谱柱和仪器不被损坏。

压力变宽 pressure broadening 又称为碰撞变宽。处于热运动中的辐射原子与分析体系内其他粒子发生碰撞，使辐射过程中断，导致激发态原

子寿命缩短，引起谱线变宽。谱线的碰撞宽度远大于谱线的自然宽度，碰撞变宽的线型函数是洛伦兹型函数。碰撞宽度随气体种类与气压不同而不同。参见**碰撞变宽**条。

压力上限 pressure high limit 色谱仪工作时预先设定的一个最高工作压力值。当工作压力超过此设定压力上限时，仪器自动停止输液泵的运行并发出警示，以保护色谱柱和仪器不被损坏。

压力梯度校正因子j pressure gradient correction factor j 在气相色谱中，载气流经色谱柱时，由于柱入口与出口之间有压力差，沿柱管方向形成压力梯度，又由于气体的可压缩性，同时也存在一个流速梯度。通常测量的是柱出口处的流速，一般高于柱管内真正的流速，由此流速计算得到的保留体积也偏大。为了校正由梯度引起的差别，需以压力梯度校正因子j来进行校正。如平均流速F_c和柱出口流速F_0的关系为$F_c=jF_0$，其中

$$j=\frac{3}{2}\frac{\left(\frac{p_i}{p_0}\right)^2-1}{\left(\frac{p_i}{p_0}\right)^3-1}$$

式中，p_i、p_0分别为色谱柱进、出口的压力。

压力下限 pressure low limit 色谱仪工作时预先设定的一个最低工作压力值。当仪器流路出现漏液等故障，使工作压力低于此设定压力下限时，仪器自动停止输液泵的运行并发出警示。

亚化学计量反同位素稀释法 substoichiometric reverse isotope dilution method 基于亚化学计量反应的反同位素稀释法。其原理是，将放射性试液分为相等的a、b两份，每份试液中含有被测元素W_x，在b份试液中加入已知量为W_c的被测元素的稳定同位素载体，在a和b两试液中分别加入比化学计量少的、等量的试剂，从两试液中分离出相同部分量的被测定物质，分别测量两试液中的放射性活度A_a和A_b，由此可以测定试液中的被测元素的含量：$W_x=\frac{A_b}{A_a-A_b}W_c$。

参见**反同位素稀释法**条。

亚化学计量分析法 substoichiometric analysis 通过在放射性同位素标准溶液与用其进行同位素稀释的被测样品溶液中，分别加入比化学计量少的、等量的试剂，从标准溶液与被测溶液中分离出相同部分量的被测定物质，测量两者的放射性活度而进行定量分析的一种同位素稀释法。1958年由日本学者铃木信男和1961年前捷克斯洛伐克学者J. 卢齐卡（J. Ružička）分别独立提出。被测物质的含量W_x按下式计算。

$$W_x=W_0\left(\frac{A_s}{A_x}-1\right)$$

式中，W_0是标准溶液内被测物质的已知含量；A_s与A_x分别是从标准溶液与样品溶液所分离出来那部分量的放射性活度。本法的优点是以放射性活度测定代替了比放射性活度测定，简化了分析操作；灵敏度高，多数元

素达到 10^{-6}g，有些元素可达到 10^{-10} g；选择性好；不必考虑化学回收率，避免了定量分离的困难；易于自动控制等。主要的限制是有些元素没有合适半衰期的放射性同位素作为指示剂。广泛地用于化学、生物化学和高纯材料分析等领域。

亚铁磁性 ferrimagnetism 晶体中存在A、B两种磁性原子(或离子)，它们的磁矩方向在负的交换作用下而分为方向相反的两组，因各组中的原子(或离子)数目或总磁矩不同而产生的自发磁化形成的磁性称为亚铁磁性。与铁磁性一样，当温度高于居里温度时自发磁化消失，一般变为顺磁性。具有亚铁磁性的物质叫做亚铁磁体。例如磁铁矿(Fe_3O_4)就是亚铁磁体。

亚稳离子 metastable ion; MI 被分析物的离子在离开离子源之后，到达检测器之前，中途发生裂解的离子。其寿命在 $10^{-5}\sim10^{-6}$s 之间。它在飞行过程中发生裂解产生的离子峰叫亚稳峰。

亚稳离子裂解 metastable ion decay; MID 指亚稳离子的分解，其谱称为亚稳离子分解谱，简写为MI 谱。

亚稳态原子 metastable atom 原子在某些高能级比较稳定，可以停留较长时间（约 10^{-3}s），这种能级称为亚稳态，处在这一能态的原子则称为亚稳态原子。

亚硝酸盐氮 nitrite-nitrogen; NO_2^--N 亚硝酸盐氮（NO_2^--N）是氮循环的中间产物，不稳定，根据环境条件，可被氧化成硝酸盐，也可被还原成氨。亚硝酸盐可使人体正常的血红蛋白（低铁血红蛋白）氧化成为高铁血红蛋白，发生高铁血红蛋白症，失去血红蛋白在体内输送氧的能力，出现组织缺氧的症状。亚硝酸盐可与仲胺类反应生成具有致癌性的亚硝胺类物质，在pH值较低的酸性条件下，有利于亚硝胺类的形成。水中亚硝酸盐的测定方法通常采用重氮-偶联反应，使生成红紫色染料。亚硝酸盐在水中易受微生物等作用，因而很不稳定，在采集后应尽快进行分析，必要时以冷藏抑制微生物的影响。

氩电离检测器 argon ionization detector 其工作原理与氦电离检测器完全相同，只是用氩气作载气。由放射线激发得到的亚稳态氩原子具有11.5eV的能量，经过碰撞可使绝大部分的有机物分子电离，有离子流信号输出。检测限可以达到 $10^{-12}\sim10^{-14}$g·s^{-1}，线性范围约 10^5，对电离势高于11.6eV的无机气体及甲烷没有响应，因此，对氩气中的无机气体杂质含量要求不严。参见**氦电离检测器**条。

烟羽不透明度测定 fumy plume opaque determination 从工厂烟囱中连续排放出来的烟体，外形呈羽毛状，因而得名。烟羽不透明度测定是用林格曼烟气浓度图按烟尘的视觉黑度进行监测。办法是把图放置在适当的位置上，使图上的黑度与烟气的黑度（或不透光度）相比较，凭视觉进行评价。林格曼图有多种规格，通用的

标准形式由 14cm × 21cm 的黑度不同的6块图组成。除全白和全黑两块外，其他4块是在白色背底上画上不同宽度的黑色条格。根据黑色条格在整个小块中所占的面积百分数分成零至五的林格曼级数。零级是全白，五级是全黑，一级是黑色条格占整块面积的20%，二级占40%，依次类推。

延迟引出 delayed extraction 用于飞行时间质谱的一种技术，对利用激光解吸等脉冲式方法产生的离子，在离子产生一定时间（几十纳秒）之后再施加引出电压，这样可以抵消运动能量的分散。通过此方法可提高飞行时间的分辨能力，从而得到较高分辨率的质谱图。

延迟荧光 delayed fluorescence 与一般荧光光谱的形状、位置完全相同，但发光寿命却长很多的发光称为延迟荧光。它的寿命在 10^{-3}s 甚至更长。其发光机理有三种，第一种是，在光照下产生的阳离子与刚性溶剂、结晶等周围体系捕获的电子在一定时间后再次结合产生第一激发单线态，从而发光；第二种是三线态分子受热激发后再发光，此称为 α 磷光或 E 型延迟荧光。第三种是两个三线态分子相互作用产生第一激发单线态后再发光，称为 P 型延迟荧光。

盐桥 salt bridge 一种消除液体接界电势的装置，由迁移数相近的盐的浓溶液固定在 U 形玻璃管中制成。盐溶液可用琼脂胨胶或砂芯玻璃固定。用盐桥将两个半电池接通可避免两半电池中溶液的直接接触，以消除原有的液接电势。液接电势产生的原因是界面上带电粒子迁移不均衡所致。改用盐桥后，由于盐桥中电解质的浓度很高，两个新界面上的扩散作用主要来自盐桥，加上盐桥中正、负离子的迁移数几乎相等，使得新界面上的液接电势趋于稳定，且起对消作用，从而使液接电势减到最小，以提高测量的精度。盐桥电解质的条件是：（1）正、负离子的迁移速率大致相等（如 KCl、KNO_3、NH_4NO_3 等），且可达到较高浓度；（2）与半电池中溶液不发生化学反应。

盐桥支撑双层磷脂膜 salt bridge supported bilayer lipid membrane 简称 sb-BLM。是以通常在电化学中用作盐桥的水凝胶，即琼脂或琼脂糖为支撑载体形成的双层磷脂膜。凝胶的高黏度性可为薄层膜提供稳定的支撑，同时它也可作为水相界面，使得离子可以通过。

盐析色谱法 salting-out chromatography 以盐析作用为主要分离机理的液相色谱方法。固定相为离子交换树脂，流动相为无机盐水溶液，用于非电解质溶液的分离。为了避免固定相表面的离子交换作用，离子交换基团上的可交换离子（反离子）应与流动相中的离子相同。

盐析纸色谱法 salting-out paper chromatography 是用于蛋白质类分离的一种纸色谱法。在水流动相中加入盐类或有机溶剂，如乙醇、丙酮等，使组分的溶解度减小，被纸吸附的作用

加强，从而使各蛋白质组分的移动距离有较大差别，从而达到较好的分离。

盐析作用 salting out effect 向含有机物或蛋白质的溶液中加入大量无机盐时，有机物或蛋白质的溶解度降低的现象称为盐析作用。泛指加入大量电解质使有机或大分子化合物在水中溶解度降低的现象。盐析作用包括有机物或大分子电荷的中和与去溶剂化作用两个方面。由于加入盐后生成的大量离子的水合作用，使溶剂的活度降低，导致蛋白质的溶解度下降，硫酸铵是使蛋白质沉淀的常用无机盐。溶解度 S 与盐的离子强度 I 之间符合公式 $\log S = C - K_s I$，其中 C、K_s 为常数。C 随 pH 或温度而变，当溶质以及盐的种类一定时，K_s 也为定值，称为盐析常数。盐析作用在蛋白质以外的其他亲水性大分子中也很常见，如在制皂工业或合成染料工业中，常将固体食盐或浓盐水加入皂液或染料溶液中，使钠皂或染料从溶液中析出。溶剂萃取法中加入某些无机盐可提高萃取分配比。

盐效应 salt effect 当水溶液中加入大量某种盐时，使溶液中另一种物质溶解度发生改变的现象称为盐效应。其中，若加入大量盐使另一种物质溶解度增加，称为盐溶效应（salting in effect），反之则称为盐析效应（salting out effect）。在沉淀反应中，加入与构成沉淀的离子不同的其他离子时，常使沉淀的溶解度增大。其实质是大量的其他离子的存在使溶液中的离子强度增大，离子的活度系数相应减小，使原来饱和的难溶盐溶液变为不饱和，因此沉淀的溶解度增大。另一方面，加入某些盐可使有机物或萃取络合物在水中的溶解度降低从而使其易于被有机溶剂萃取。

颜色 color 人眼不但能感知光的明暗强度，还能感知可见光（以及物体）的颜色。在色度学中，颜色是彩色和非彩色的总称。彩色有红、橙、黄、绿、青、蓝、紫、……，非彩色是指白色、黑色及其中间不同深浅的灰色。彩色有明度、色调、饱和度等特性，非彩色中白色明度最高、黑色明度最低，非彩色没有色调区别。颜色可以互相混合（可以是颜色光的混合，也可以染料的混合），混合后获得的颜色不论其光谱组成是否一样，只要视觉上颜色外貌相同就具有相同的视觉效果。两种互补色（例如黄—蓝、红—绿等等）能够混合产生白色或灰色。

衍射衬度明场和暗场像 light and dark filed image 通常衍射衬度明、暗场成像分析总是与选区电子衍射相结合来确定物相的显微形态、点阵类型和参数。如果用物镜光阑挡住衍射束，只让透射束穿过光阑孔成像，称为衍射衬度明场像。如果用物镜光阑挡住投射束和大多数衍射束，只让某一衍射束穿过光阑孔成像，显然，样品上对该衍射束有贡献的区域或物相在暗场像上呈现亮的衬度，称为衍射衬度暗场像。利用特定的衍射束做衍射衬度中心暗场像是分析复杂衍射图，显示各单相晶体学特性的有效方

法之一。

衍射光栅 diffraction grating 基于单缝衍射与多缝干涉作用使复色光发生色散的光学器件，多缝干涉决定了各级谱线的位置，单缝衍射决定了各级谱线的相对强度分布。光在行进过程中遇到障碍物时，会发生衍射；若障碍物具有规律分布的（例如平行、等宽的多缝）结构时，会对入射光波的波阵面产生规律性的分割或阻拦，因而造成衍射后的光干涉效应，使出射光形成有规律的明暗交替分布，这种具有规律分布结构、能使光发生衍射和干涉、形成确定规律分布光强的光学部件，称为衍射光栅。它是在像铝那样的高度抛光表面上刻划许多条平行线槽而成。因为光的衍射和干涉程度直接与光的波长有关，不同波长的光在同一块衍射光栅上形成的出射光分布规律不同。所以衍射光栅可以将混在一起入射的不同波长光彼此分离出射，即具有色散作用，因而常被用作光谱仪器的色散元件单色器。

衍射花样 diffraction pattern 电镜中用透射方法产生的电子衍射的图案。分为斑点花样、环花样和菊池线花样三种。电镜的常规电子衍射花样主要用于确定：物相和它们与基体的取向关系；材料中的滑移面；形变、辐照等引起的晶体缺陷状态；有序、无序、Spinodal 分解、磁畴和类似现象等。

衍射群 diffraction symbol 空间群按其平移对称性所作的分类。根据空间群所具有平移对称性的差异，可以把 230 个空间群分成 120 个衍射群。由于不同的平移对称性在衍射空间产生特征的系统消光，观测衍射空间存在的系统消光规律就可以确定晶体所属的衍射群。有少数衍射群惟一地对应于一个空间群，但是大多数衍射群都包含着一个以上的空间群，需要通过其他手段，如分析衍射强度的统计规律、测定某些物理特性、试解晶体结构等，才能最后确定晶体所属的空间群。

衍射指标 diffraction indices 表示衍射与倒易点阵点（h，k，l）关系的符号，记为 hkl。衍射指标与晶面指标的不同之处在于：三个整数 h、k、l 不必是互质的。当波长为 λ 的 X 射线照射在晶体上时，若沿 X 射线入射方向通过倒易点阵的原点 O 画一条直线，并在此直线上取一点作为球心，以 $1/\lambda$ 为半径画一个与 O 点相交的球，则称此球为反射球（Ewald 球）。保持 O 点不动，转动晶体，当倒易点阵点（h，k，l）与反射球面相交时，从反射球心到交点连线的方向就是衍射 hkl 的方向。各种收集衍射数据方法的基本原理，都是根据反射球和倒易点阵的关系而设计的。

衍生化法 derivatization method 在色谱分析中，为了使某种(或某类)物质易于检测或易于保留，将被测物与一种试剂(衍生化试剂)反应后使之转变成希望的可检测或可保留化合物。如氨基酸的 HPLC 分析，通常需要用具有紫外或荧光性质的衍生化试剂将氨基酸衍生成可进行紫外或荧光检测的形式。又如用 EDTA 等配位体作衍生

化试剂可以将过渡金属离子转变成配阴离子而在阴离子交换柱上分离。

衍生化试剂 derivatization reagent 用来与分析对象化合物反应生成具有特定性质化合物的试剂。例如，可用具有强紫外吸收的紫外衍生化试剂与无紫外吸收被测物反应，生成可进行紫外检测的化合物。

衍生室温磷光法 derivatization room temperature phosphorimetry; DRTP 通过衍生试剂与待测组分的化学反应，使原本不能发磷光的待测组分转变为具有磷光性质的物质，继而通过各种室温磷光分析技术实现磷光测量的方法。此法大大扩大了 RTP 测定的对象。

掩蔽 masking 通过加入某种（些）试剂，与干扰组分形成配合物、配离子、难离解物质等，极大地降低干扰组分的浓度，使其不经分离操作即可消除其干扰实现待测组分的鉴别或测定的方法。例如，在 KCN 存在下，可以在 Zn^{2+} 共存时用 EDTA 配位滴定法测定 Mg^{2+}，就是利用 CN^- 对于 Zn^{2+} 的络合掩蔽作用，KCN 称为掩蔽剂。当在滴定 Mg^{2+} 后的溶液中加入甲醛，由于 $Zn(CN)_4^{2-}$ 被破坏而释放出 Zn^{2+}，从而可继续用EDTA滴定 Zn^{2+}。此时甲醛称为解蔽剂。

掩蔽指数 masking index 定量表征掩蔽效率的数值，通常用 $\lg\alpha_{N(X)}$ 表示。当用掩蔽剂（X）络合掩蔽某金属离子（N）时，掩蔽效率的大小可用 $\alpha_{N(X)}$ 表示

$$\alpha_{N(X)}=\frac{[N]+[NX]+\cdots+[NX_n]}{[N]}$$
$$=1+[X]\beta_1+\cdots+[X]^n\beta_n$$

因为 $[N]=\dfrac{[N']}{\alpha_{N(X)}}\approx\dfrac{c_N}{\alpha_{N(X)}}$

所以 $\alpha_{N(X)}$ 值越大，游离的金属离子浓度［N］越小，其掩蔽效率越高。为方便起见用其对数值 $\lg\alpha_{N(X)}$ 表示。

焰色反应 flame reaction 一种用于判断试样中是否含有某种（些）元素的定性检出方法。它是基于高温下各种元素发出的光谱具有各自的特征波长，即具有不同的颜色，如 Li 呈红色，K 呈紫红色，Na 呈黄色，而 As、Sb 呈淡蓝色等。焰色试验采用焊有一段铂（Pt）丝的玻璃棒，用前可根据需要将铂丝前端弄成圆环，接着在稀盐酸中浸泡后放入火焰（如酒精灯火焰）上灼烧，重复操作直到铂丝清洁（火焰上看不出特别颜色），继而将附着有固体或溶液试样的铂丝放进火焰，直接观察或通过蓝色钴玻璃观察火焰颜色（后者有助于分辨两种混合起来的焰色）。

阳极 anode 发生氧化反应的电极。

阳极去极剂 anodic depolarizer 见去极剂条。

阳极溶出伏安法 anodic stripping voltammetry; ASV 电解富集过程为电还原，溶出测定过程为电氧化的溶出伏安法。一般用于测定能生成汞齐的金属离子。

阳离子交换色谱法 cation exchange

chromatography; CEC 以阳离子交换剂作固定相进行阳离子分离分析的离子色谱法。最常用的固定相是以磺酸基和羧酸基为功能基团的阳离子交换剂，最常用的流动相是稀的无机酸溶液和有机羧酸。可以用于金属阳离子、有机胺、生物碱等无机和有机阳离子的分析。

阳离子交换树脂 cation exchange resin 具有阳离子交换功能基团的离子交换树脂。其功能基团可以离解出阳离子（如 H^+）与样品阳离子进行离子交换反应。常见的阳离子交换剂的功能基团是磺酸、羧酸或磷酸基，可分为两大类：含有强酸性活泼基团（$—SO_3H$）的强酸性阳离子交换树脂，交换容量不受酸度影响，酸性、中性、碱性溶液均可使用，有机、无机、简单、复杂的阳离子全部可以交换；含有弱酸性活泼基团（如—COOH、—OH等）的弱酸性阳离子交换树脂，这类树脂受外界酸度的影响较大，如 R—COOH、R—OH 型树脂要求溶液的 pH 值分别大于 4 和 9.5。

阳离子隐蔽剂 cation masking agent 能隐蔽阳离子的试剂。隐蔽是分析监测中常用的消除干扰的有效手段。它是指在分析测试系统中加入某些试剂阻止某些化学反应进行的现象，其特点是未从该系统中除去任何成分，并且不形成新相。对实际工作重要的是选择合适的隐蔽剂。由于隐蔽剂使用对象的不同可以区分为阳离子、阴离子和电中性分子的隐蔽剂。常用的阳离子隐蔽剂有 F^-、CN^-、$S_2O_3^{2-}$、$NaPO_3$、EDTA 等。

锌盐萃取 oxonium salt extraction 锌盐萃取属于离子缔合物萃取中的一种。它利用含氧有机溶剂（醇、醚、酯和酮类）在酸性介质（HCl、HBr、HI 和 HSCN 等）中与 H^+ 形成带正电的锌离子，然后再与金属离子形成的络阴离子形成电中性的离子缔合物而被萃入有机相。例如，在 HCl 溶液中用乙醚萃取 $FeCl_4^-$ 时，溶剂乙醚与 H^+ 键合生成 $(CH_3CH_2)_2OH_2^+$ 锌离子，该带正电的锌离子与带负电的络阴离子 $FeCl_4^-$ 通过静电引力缔合成称为锌盐的电中性分子而被萃入乙醚中。这类萃取的特点是有机溶剂分子也参加到被萃取的分子中去，它既是溶剂又是萃取剂。这类萃取法的萃取容量较大，但选择性差，通常用于分离大量基体元素。

氧化安定性 oxidation stability 石油产品抵抗大气（或氧气）的作用而保持其性质不发生永久性变化的能力。油品的氧化安定性是以油品经过强烈氧化后酸值和沉淀物的数值或运动黏度和沉淀值的增加值来表示。氧化后酸值大或沉淀物多，运动黏度增大，表明油品的氧化安定性差、使用寿命不长。对于长期循环使用的汽轮机油、变压器油及大量与空气接触的压缩机油，氧化安定性指标更有重要意义。

氧化电流 oxidation current 在电极上氧化反应产生的电流。

氧化电势溶出法 oxidic potentio-

metric stripping analysis; OPSA 利用氧化剂将预电解富集的金属或汞齐化的金属氧化使之溶出，记录电位-时间曲线的方法。适合于分析痕量金属和混合金属。

氧化电位 oxidation potential 氧化电流开始流出时的电位。

氧化还原滴定 oxidation reduction titration, redox titration 以氧化还原反应为基础的容量分析方法。它以氧化剂或还原剂为滴定剂，直接滴定一些具有还原性或氧化性的物质；或者间接滴定一些本身并没有氧化还原性，但能与某些氧化剂或还原剂起反应的物质。常根据滴定剂分类为高锰酸钾法，重铬酸钾法，碘量法，铈量法等。氧化还原滴定法可直接或间接测定许多无机物和有机物，应用十分广泛。

氧化还原电位 redox potential 是一个衡量电极反应进行趋势的参数，可用作给定的氧化还原反应进行方向、次序和程度的判据。当金属电极浸在该金属的盐类溶液中时，金属电极表面的原子在溶剂作用下有离开晶格转变为溶剂化正离子进入溶液的倾向；同时在电极上负电场的吸引下，溶液中的金属离子也有在电极的表面还原的趋势。从而电极表面因聚积电子而带负电，靠近电极表面的溶液中因聚积着金属离子而带正电，形成所谓的双电层，电极和溶液之间构成一定的电势差。其数值因电极材料和金属盐的浓度而不同，称为电极电势，但至今尚无法测定其绝对值。经约定，以 1.01325×10^5 Pa 氢气所饱和的铂黑电极与含有 1mol·L^{-1} 的氢离子的溶液之间的电极电势差定为零作为基准，与待测体系构成电池，所测得的该电池的开路时的电动势，数值上即等于待测电极电势的值。其符号由该电池电流方向所决定。电子流向外电路的电极，其电极电势定为负值。并将 1.01325×10^5 Pa 下，溶液中参加电极反应的离子活度为1mol·L^{-1}时的电极电势称为标准电极电势，即在标准状态下这个电池的电势值便是 M^{n+}/M 电势，记作

$$\varphi^{\ominus}_{M/M^{n+}}$$

用来表示电极反应为：$M \rightleftharpoons M^{n+} + ne$ 时的标准电极电势，即氧化（还原）电势。非标准状态下的氧化（还原）电势，可根据 Nernst 方程进行$\varphi=\varphi^{\ominus}+\frac{RT}{nF}\ln\frac{c_1}{c_2}$计算。式中 $\varphi^{\ominus}$ 是标准氧化（还原）电势；R 为气体常数；T 为绝对温度；n 为这一氧化反应中电子转移数；F 为法拉第常数；c_1 为氧化态物质浓度；c_2 为还原态物质浓度。利用氧化（还原）电势进行比较，可以准确无误地判断各氧化剂（或还原剂）的氧化（还原）能力的高低。

氧化还原酶 oxidoreductase 在两分子间的氧化还原反应中起催化作用的酶的总称，包括氧化酶和脱氢酶两类。如葡萄糖氧化酶、乳酸脱氢酶、细胞色素氧化酶及过氧化氢酶等。

氧化还原指示剂 redox indicator 氧化还原滴定中用于指示滴定终点的某些化学物质。可分为三类：（1）

自身指示剂。例如，高锰酸钾（$KMnO_4$）法中，当用 $KMnO_4$ 滴定无色或浅色的还原剂溶液时，稍微过量的 MnO_4^- 即可使滴定溶液呈粉红色，指示终点的到达；（2）显色指示剂，它本身不具氧化还原性，但能与氧化剂或还原剂产生特殊的颜色来指示滴定终点。例如，碘量法中常用淀粉溶液作指示剂。它能与碘（I_2）溶液生成深蓝色的化合物，利用滴定溶液蓝色的形成或消失（I_2 的形成或 I_2 还原为 I^-），可用于判定滴定终点；（3）滴定中发生氧化还原反应的指示剂，是应用最多的一类氧化还原指示剂。这类指示剂的氧化态和还原态具有不同颜色，当滴定到化学计量点时，稍过量的氧化性（或还原性）滴定剂就能使它氧化（或还原）成它的氧化态（或还原态）产生特征的颜色变化而指示终点的到达。

氧化磷酸化 oxidative phosphorylation 是生物体内重要的能量转换途径。主要指在线粒体内进行的生物氧化过程中，释放出的能量可使二磷酸腺苷（ADP）氧化磷酸化，生成含两个高能磷酸键的三磷酸腺苷（ATP）。后者在需能的场所又能释放能量，因此氧化磷酸化成为生物体内一种有效的贮能方式。它是需氧细胞生命活动的基础，是主要的能量来源。

氧化铝薄层色谱板 alumina TLC plate 将含有 5% ~20% 石膏的氧化铝粉末用水调成浆状，均匀地铺在一块玻璃或其他材料的平板上，形成一定厚度的薄层，制成氧化铝薄层色谱板，Al_2O_3 的粒度为 5 ~40μm，比表面积 $100 \sim 350m^2 \cdot g^{-1}$，平均孔径为 20 ~80nm，氧化铝薄层色谱板被广泛用于中等极性的化合物的分离。

氧化铝色谱法 alumina chromatography 以活性氧化铝微粒为固定相的吸附色谱方法。

氧化铝吸附法 aluminum oxide adsorption 氧化铝是对水具最大亲和性的固体之一。由于它的亲水性和大的表面积，除用于色谱固定相外，工业上重要的应用是气体和液体的干燥。可用它干燥的工业气体包括：Ar、He、SO_2、NH_3 和氟利昂、氟氯烷等。特别重要的应用是干燥由石油馏分热裂解生产的碳氢化物。

氧化性火焰 oxidizing flame 可燃混合气中助燃气含量高于化学计量时燃烧所形成的火焰。燃烧完全，但不很稳定，火焰中氧气的分压较大，富含有 OH、O_2、O、NO 等氧化性物质，呈氧化性。随着助燃气含量升高，火焰温度降低。适用于氧化物稳定性差的元素（如金、银、铂、铑等）的测定，不宜用于氧化物难解离元素的测定。

氧化亚氮-乙炔火焰 nitrous oxide-acetylene flame 一种广泛用于原子吸收光谱分析的高温化学火焰。1965 年威尼斯（J. B. Willis）首先将它用于原子吸收光谱分析。根据计算，其最高火焰温度为 3152K，实验测定值是 2990K，最高燃烧速度是 $160cm \cdot s^{-1}$，在室温下着火下限和上限分别为 2.2% 和 67%（体积比）。主要的

特点是火焰温度高，燃烧速度低，火焰的红色内燃区（分析区）富含CN、NH等还原性物质，有利于易形成难解离氧化物的高温元素的原子化，是当前在火焰原子吸收光谱分析中惟一获得广泛实际应用的高温火焰。缺点是在某些光谱波段区有很强的自发射噪声和高温引起的元素原子的电离。使用该高温火焰要注意安全，点火时，先点燃空气-乙炔火焰，再过渡到氧化亚氮-乙炔火焰，在熄灭火焰时，要先将氧化亚氮-乙炔火焰转换为空气-乙炔火焰后再熄灭火焰。现代化的原子吸收光谱仪器能对火焰实现自动控制，保证安全地工作。

氧敏感电极 oxygen electrode 见克拉克氧电极条。

氧屏蔽火焰 oxygen-shielded flame 两侧有氧屏蔽层的火焰。在燃烧缝旁有两排气孔，氧气由两排气孔流出，将火焰屏蔽。氧气流在外焰区氧化乙炔，燃烧产生大量的热，使火焰温度升高，但整个火焰仍保持富燃状态，内燃区呈现强还原性，可用于铝、铍、钒、铟、钛、钨等易形成难解离氧化物的元素的测定。燃烧器结构复杂，温度不及氧化亚氮高，未能得到广泛的应用。

样本 sample 又称为子样。从总体所包含的全部个体中抽取的一部分个体的集合。样本中所包含个体的数目，称为样本容量，又称样本的大小。

样本标准（偏）差 sample standard deviation 由样本值计算的标准偏差，记为S

$$S=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}}$$

式中，x_i是单次测定的样本值；$\bar{x}$是样本值的平均值；n是样本值的数目；S是总体标准偏差σ的无偏估计值，用来估计总体标准偏差没有系统误差。标准偏差不具有加和性。它是分析测试中最常用来表征测量精密度的参数。

样本方差 sample variance 由样本值计算的方差，记为S^2

$$S^2=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}$$

式中，x_i是单次测定的样本值；$\bar{x}$是样本值的平均值；n是样本值的数目，即样本容量；S^2是总体方差σ^2的无偏估计值，用来估计总体方差没有系统误差。方差具有加和性，其方根值称为样本标准偏差。

样本净化 sample cleanup 从待测样本提取液中将农药与杂质分离并去除杂质的步骤。使用溶剂从样本中提取农药时，样本中的脂肪、蜡质、色素、有机酸和糖等会同农药一起被提取出来，严重干扰残留量的测定。净化的要求和方法，和检测方法有关。如采用专一性强的火焰光度监测器测定有机磷或有机硫农药时，不需复杂的净化步骤。而使用抗干扰能力差的电子捕获检测器测定有机氯或菊酯类农药和使用氮磷检测器时，对净化要求必须严格，否则杂质会影响测

定结果，还可能污染检测器。常用的净化方法有液-液分配法、柱层析法、吹扫蒸馏法、磺化法、凝结剂沉淀法、固相萃取法等。

样本(平)均值 mean of sample 一组样本测量值的平均值，全部测量值总和除以测量定次数。分为简单平均值即算术平均值和加权平均值。在有限次测量中，对样本进行多次重复测量所得到的平均值，是一组测量值中出现概率最大的值，是总体平均值的无偏估计值，因此，可用它来报告测量结果。

样本容量 sample size; sample capacity 又称样本的大小。是样本中所包含个体的数目。

样本提取 sample extraction 化学分析中用溶剂把农药从试样中提取出来的步骤。需根据试样的类型、农药种类、试样中脂肪、水分含量和最终测定方法等来选择提取方法和提取溶剂，以便尽可能完全地提取出试样中所含的农药，而尽量少地提取出干扰物质。残留分析试样中农药含量甚微，提取效率的高低直接影响结果的准确性。提取方法因样品类型不同而不同，大体可分为五类：(1) 水样，直接用溶剂提取或用吸附剂吸附提取；(2) 土壤样本，用含水溶剂或混合溶剂提取；(3) 含水量高的样本，如水果、蔬菜等，用与水相混溶的溶剂或混合溶剂提取；(4) 含脂肪量高的样本、如谷物、豆类、油料作物等，用非极性或极性小的溶剂提取；(5) 动物组织，用消解法提取。

样本值 sample value 对样本进行测量所得到的测量值。样本值是一个随机变量，由不同的样本所得到的样本值可能是不同的。在测量值遵从正态分布的条件下，样本值以指定的概率落在 ($\bar{x}-u\sigma$, $\bar{x}+u\sigma$) 区间内，其中，u 为与指定概率有关的系数，可由正态分布表中查到。样本平均值 $\bar{x}$ 是总体平均值 μ 的无偏估计值，用来估计总体平均值没有系统误差。

样品带 sample zone 采样环中的样品被载流推入到流路系统后，样品按流体力学规律形成了一个特殊形式的分散带，称为样品带。

样品复型 topography copy 将固体样品表面的微观形貌复制到薄膜上，然后通过电镜分析薄膜获得固体样品表面形貌的一种方法。一般采用火棉胶等无结构材料进行复型，一般复型的分辨率可以达到 2～5nm，主要有断口复型、金相复型和萃取复型。多用于金相组织、断口形貌、形变条纹、磨损表面、第二相形态及其分布、萃取相结构分析等。

样品环 sample loop 又称定量管或定量环。是阀进样器上用来准确确定进样体积的金属管，其体积是固定的。液相色谱中通常使用的是 10，20，50μl 体积的样品环。

样品激发 sample excitation 光源提供能量使样品蒸发并形成气态原子或进一步吸收能量电离成离子。原子或离子从较低能态跃迁到较高能态的过程称为激发。处在激发态的原子或

离子不稳定，当其回到基态或较低能态时可发射辐射。

样品污染 sample contamination 是指样品在分析过程中受到的污染。在电子能谱分析中，样品污染主要来自于真空室中的残余有机物、活性氧以及水分等。当真空度低时，样品表面就很容易被这些环境成分所污染。在电镜分析中，样品污染一方面来自于真空中的各污染物质，另一方面来自于电子与表面吸附物质的作用，最后沉积在样品表面产生污染。

样品吸喷速度 rate of sample aspiration 简称进样速度，是单位时间内雾化器喷雾试液的体积（$ml \cdot min^{-1}$）。吸喷速度过大，气溶胶粒度大，在通过火焰区的短时间内（ms 级）不能有效地脱溶、解离和原子化，对原子吸收信号不仅没有贡献，反而会消耗大量热量，对火焰有强烈的冷却效应。吸喷速度过小，会降低测定灵敏度。合适的吸喷速度需通过实验确定。

样品预处理 sample pretreatment 根据分析方法的要求，在采样后到化学分析之前，为制备适合于测试而预先对样品进行适当的处理，如过筛、脱壳、粉碎、切细、捣碎、匀浆、过滤、超滤、离心、溶解、分离、纯化、浓缩等操作。对于具体样品视样品种类和分析要求可以使用其中一部分或全部预处理操作。

样品蒸发 sample evaporation 由光源提供能量使样品从固态或液态转变为气态的过程称为样品蒸发。样品的蒸发行为与样品基体成分和欲测元素的性质有关，因此控制样品的蒸发过程可适当改善测量效果。如将易挥发的元素预先蒸发出来，而难挥发的基体随后蒸发，可提高易挥发元素的检出限。

遥测 remote sensing 一种自动化程度很高的监测手段，其重要功能是可以进行远距离、大地域乃至全球性的跟踪测量，从而更全面、更深入和综合地了解目标成分在大范围内的转移、传递过程，提供定点、定域或近距离测量无法得到的丰富和动态的信息。遥测技术不需要设置许多测定点，仅用一台设备即可流动连续操作，迅速地获得大区域三维空间的实时数据。例如，可以测定大气中污染物的总携带载量，相对污染浓度，污染物的迁移流率，烟羽的动态分布，大气扩散参数以及定量研究点源、面源、流动源扩散规律等。这种技术的局限性是仅能测出污染物的相对浓度，必须借助于其他手段方可换算成某一区域内的平均浓度，同时从环境监测的要求来看灵敏度还不够高。目前用于大气污染监测的遥测技术有相关光谱仪和激光器遥测。

遥感傅里叶变换红外光谱法 remote sensing Fourier transform infrared spectroscopy 一门较新的测量热气体温度的技术。用高分辨的傅里叶变换红外光谱仪测量热气体的分子光谱，能够获得清晰的分子带状光谱的转动精细结构。由于受激旋转能态的相对布居数强烈地与温度有关，可采用红

外光谱法来测量热气体温度。该方法的优点是：（1）非接触式的、遥测、不干扰热气体流场；（2）凭借分子激发转动能态产生的精细结构中的一系列光谱线的光谱强度与温度的关系来决定热气体温度，所估算的温度要比采用其他的方法测出的温度准确得多；（3）借助于热气体温度和那些具有红外激活振动跃迁的各种气体的浓度，可进行半定量分析。

药剂持留能力 retentivity of pesticides 又称粘着性。指药剂在靶体表面上的粘附能力。药剂喷施后主要以粉粒或药膜的方式覆盖在靶标表面，其粘附能力表现为机械性粘附、物理粘附和化学亲合性粘附。

药物动力学参数 pharmacokinetic parameter 在药物动力学研究中，药物体内过程的特征是以药物动力学参数来表示的。根据参数的大小可以分析药物体内过程的规律，预言药物的变化趋势。参数可由不同的药物动力学模型经特定的数学公式计算而得，主要的参数可分为以下几类：（1）表示药物在体内吸收快慢和程度的参数，如吸收速率常数、药峰浓度、药峰时间、曲线下面积、生物利用度；（2）表示药物在体内分布情况的参数，有分布速率常数、表观分布容积等；（3）表示药物从体内消除情况的参数，如消除速率常数、生物半衰期、总清除率、器官清除率等等。

药物筛选测定 drug screening assay 对疑有药物过量或药物滥用的昏迷病人的血、尿、胃液等体液标本进行疑似药物的定性分析。所选方法应具备较高的敏感性以避免假阴性结果。对于阳性结果应重复测定并加以定量。

野外或现场生物监测 field and/or biological monitoring 用生物作指标对环境质量变化进行监测。根据指示生物、生物指数、物种多样性指数、群落代谢、生物测试、生理生化特征及残毒等方法监测大气、水体环境质量或污水、废水毒性。如根据植物中毒症状判断某地或某工厂的大气污染情况：紫花苜蓿、棉花等叶片的叶脉之间出现不规则的白色、黄色斑点或块状坏死，反映 SO_2 污染；烟草叶片出现红棕色斑点状坏死，指示 O_3 污染；番茄叶背出现古铜色坏死、叶片卷曲，表明过氧乙酰硝酸酯（PAN）污染；唐菖蒲叶尖、叶缘坏死为大气氟污染症状。

液滴逆流色谱 drop counter-current chromatography；DCCC 一个轻的与管壁表面的亲和力弱的液相在通过另一重的、互不混溶的液相时，能观察到非常活跃的界面运动而形成离散的液滴，液滴作为流动相，连续不断地穿过作固定相的液相，从而有效地提供稳定的交换界面。DCCC 的仪器是数百根相互连接的小孔径硅烷化玻璃管柱，柱管内充满液体固定相，流动相液滴连续穿过所有柱管，在理想的条件下，如果每个液滴在此体系中能保持一定的离散度，那么它就会形成一个塔板，样品在固定相和液滴之间反复分配使各组分相互分离。

液固色谱 liquid-solid chromatography 流动相为液体，而固定相为固体的色谱分离模式。液相色谱可按固定相的状态分为液-液色谱和液固色谱两类。

液晶固定相 liquid crystal stationary phase 对色谱分离起实质作用的功能基团为液晶分子的固定相。

液膜分离 liquid film separation 基于互不相溶的两液相间的选择性渗透、化学反应、萃取和吸附等原理而进行分离和富集的方法。它把萃取中的萃取和反萃取过程结合在一起。由于液膜很薄，欲分离组分从膜外相透过液膜进入膜内相而得到富集。液膜分离传质快、效率高，可用于提纯元素，浓缩 Na^+、K^+、Cs^+、Cu^{2+} 等阳离子以及 Cl^-、SO_4^{2-}、NO_3^- 等阴离子。

液态离子交换剂 liquid ion exchanger 具有离子交换功能基团，可以用于离子交换分离的液体有机化合物（如高分子胺）。它们大多是离子对试剂，将它们溶于流动相后动态涂渍到多孔硅胶或非极性键合相上，形成动态包覆离子交换层，可进行动态离子交换色谱分离。

液体池 liquid cells 液体池是用来测定液体样品的部件。诸多种类的液体池均由二片能透过红外光的窗片及能使液体池产生一定厚度的垫片组成。液体池分固定液池和可卸液池。固定液池是根据需要所选定厚度的密封池，由两个窗片中间以间隔片组成池体，放在金属或塑料框架中，框架与盐片之间加垫片以防窗片压碎，主要用于定量分析。固定液池的厚度因为安装时压紧的缘故，往往要比原来选择的铅隔片厚度要小。因此，固定液池必须先用干涉条纹法测量其精确的厚度。可卸液池的组成与固定液池相同，不过窗片间隔片一般使用铝箔或聚四氟乙烯薄膜，间隔片与窗片间可以拆卸。可卸池的厚度一般最小为15μm，其清洗比固定液池容易些，可用于黏稠样品及难于清洗的样品的测定。除此之外，还有体积很小的微量池用于测定微量样品，其体积可小至2μl；供变温操作时使用的加热池、低温池等。

液体二次离子质谱法 liquid secondary ion mass spectrometry; LSIMS 二次离子质谱法的一种。将样品与液体基质混合，用几千到几万电子伏特的一次离子（如 Ar^+，Xe^+，Cs^+ 等）对液体基质混合物进行轰击，从而生成样品二次离子。该法得到的谱图与用快原子轰击法（FAB）得到的谱图几乎相同。通常用于有机物的分析。

液体高分辨 NMR 谱 liquid high resolution NMR 液态化合物或固体化合物的溶液，在不黏稠的状态下（否则应用溶剂加以稀释），测得的 NMR 谱图，表现为具有许多精细结构的谱峰。它们的峰宽大多数相当窄，通常小于0.5Hz，利用这些信息可以推测单个化合物分子内部的结构，常称为液体高分辨 NMR 谱。通常所说的 NMR 谱实际上大多数场合

下是指此种类型的 NMR 谱。

液体接界电势 liquid junction potential 又称液接电位或扩散电势。是两种组成或浓度不同的电解质溶液相接触时，在界面两侧产生的电势差。在液体接界区域，离子会向浓度较低的一侧扩散。溶液中各种正负离子扩散速率不同，使界面两侧产生电势差。液体接界电势数值不大，一般不超过 0.03V。工业电化学测量及精度要求不高的一些测定中可以忽略，但由于扩散过程的不可逆性，液接电势属非平衡电势，它的存在影响了电极电势的正确测量。故精确的电动势测量工作应采用无液体接界的电池。在有些无法消除不同电解质溶液接界的情况下，采用“盐桥”是减小液接电势的有效方法。使用盐桥后电势测量精度均为 1～2mV。

液相传质阻力 resistance of liquid mass transfer 指组分分子由气液界面扩散至固定液内部进行浓度分配，达到平衡后再返回两相界面的传质阻力。由于存在传质阻力，传质速率有限，传质过程不能瞬间完成，因此引起了区域的扩展。液相传质阻力随流动相流速的增加而增加，另外还与样品的性质、固定液的性质、用量和分布状态以及柱温等有关。参见**传质阻力**条。

液相化学发光 liquid phase chemluminescence 反应物都为液体的化学发光称为液相化学发光。通常说的化学发光主要是指液相化学发光。液相化学发光已被广泛地应用各种分析领域。

液相色谱法 liquid chromatography 以液体为流动相，以固体或液体为固定相的色谱方法。它包括柱液相色谱法和平板液相色谱法（纸色谱和薄层色谱），在不做特殊说明的情况下，通常指柱液相色谱。

液相色谱-傅里叶变换红外光谱联用 LC-FTIR 液相色谱与傅里叶变换红外光谱相结合的一种分析方法。液相色谱的特点是不受样品挥发度和热稳定性的限制，分离效率高。它与红外光谱定性鉴定的有效性相结合，为沸点高、极性强、热稳定性差的大分子和生化活性物质等的分离、鉴定和分析提供了有效手段。LC-FTIR 联用系统主要由色谱单元、接口和红外谱仪组成。

液相色谱-质谱分析法 liquid chromatography-mass spectrometry; LC-MS 简称液质联用。是（高效）液相色谱分离与质谱检测相结合的分析方法。该方法结合了液相色谱的高分离能力和质谱的定性能力，因此，适合于组成未知或无对照品的组分的分析，在生物医药等许多领域得到了应用。

液相色谱-质谱仪 liquid chromatography-mass spectrometer 简称液质联用仪。是（高效）液相色谱仪与质谱仪的组合仪器。既可以将质谱仪看作液相色谱仪的检测器，也可以将液相色谱仪看作质谱仪的带在线样品预分离处理功能的进样装置。

液相载荷量 liquid phase loading

在气-液（或液-液）色谱中载体表面所能承受固定液的量。其大小取决于载体表面的结构、载体的比表面积和孔容。如红色硅藻土类型载体其孔穴直径约为0.4～2μm，平均1μm，表面积约为$4m^2 \cdot g^{-1}$，液相载荷量较大（可达30%以上）。白色载体的孔穴直径约为8～9μm，表面积约为$1m^2 \cdot g^{-1}$，液相载荷量较小。

液芯光纤　liquid core optical fiber　由空心石英光纤作为样品池，溶剂通常采用CS_2（其折射率1.61>石英折射率1.46）。将待测样品各种浓度的CS_2溶液充入空心石英光纤，两端用带窗口的封头封起来，激光从一端入射，另一端接受拉曼光谱。液芯光纤共振拉曼光谱可以提高拉曼光谱强度10^9倍。是测定极低浓度（10^{-10}～$10^{-15}mol \cdot L^{-1}$）的一种拉曼增强新技术。

液-液分配色谱法　liquid-liquid partition chromatography　根据溶质在液体固定相中的溶解或吸附能力的不同，因而在两相间分配系数不同使溶质达到相互分离的色谱方法。

液-液色谱法　liquid-liquid chromatography　流动相和固定相都是液体的色谱方法。作为固定相的液体往往是通过吸附、氢键或范德华力永久地或动态平衡地附着在固体载体上。由于多数情况下,固定相液体都存在一定的流失,使色谱柱的稳定性受到一定影响,因此,其实际应用受到了限制。

液-质联用仪　liquid chromatography-mass spectrometer; LC/MS; LC-MS　液相色谱与质谱仪连接的联用装置。混合物样品溶液通过液相色谱分离后，按洗脱顺序进入质谱仪，对各组分进行质谱分析。由于质谱仪是在高真空下工作，样品在引入质谱仪之前，必须除去液相色谱流动相中的大量溶剂。因此液相色谱与质谱之间加一接口。通常用液-质联用仪分析热不稳定、难挥发的化合物。

一滴液相色谱法　one drop liquid chromatography　见**微柱高效液相色谱法**条。

一贯计量单位制　coherent system of unit of measurement　由一组基本单位与一贯导出单位组成的单位制。通过比例系数为1的公式，用基本单位和辅助单位表示的导出单位，称为一贯计量单位。在国际单位制中，全部SI导出单位都是一贯计量单位，如在国际单位制中，m和s都是基本单位，而速度单位$m \cdot s^{-1}$就是通过比例系数为1的公式，用基本单位表示的单位，是一个一贯计量单位。但按约定比率由给定单位组成的SI单位的倍数单位（如1h等于3600s，h是s的非十进倍数的单位）与按约定比率由给定单位组成的SI单位的分数单位（如1m等于1000mm，mm是m的十进分数单位），都不是一贯计量单位。CGS制和国际单位制都是一贯单位制。参见**国际单位制**条。

一级标准物质　primary reference material　用权威测量方法或其他两种及两种以上不同原理的准确可靠的方法测量标准物质的特性量值，定值

的组分均匀、稳定、准确度达到国内最高水平，并经国家计量权威机构审查、批准颁布并授权生产的标准物质。一级标准物质主要用来评价标准方法、作为仲裁分析的标准与对二级标准物质定值。

一级电离 first level ionization 原子分裂成一个电子和一个离子的过程，称为一级电离。

一级离子线 first level ionic line 在一级电离中产生的离子被光源激发后，可以发射辐射产生离子谱线，称为一级离子线，在光谱中，用罗马数字Ⅱ表示。

一级耦合谱 first order coupling spectrum 分子内基团的耦合谱中，当两共振核 A、B 间的化学位移之差（以 Hz 计）与它们之间的耦合常数 J_{AB}之比 $|\delta_A-\delta_B|/J_{AB}>6$，此时谱峰所呈现的耦合裂分峰数目应满足 $2nI+1$规律，即一个核与 n 个核自旋为 I 的等同近邻核相耦合，谱线分裂成裂距相等的 $2nI+1$ 条；倘若该核有不同核近邻时，一种 n 个，另一种 n' 个，……，则将显示 $(2nI+1)(2n'I+1)$ …个峰。它们的相对强度可由自旋态的数目而定。对于$I=\frac{1}{2}$的核则便成 $(n+1)$ 规律，倘若有不同的近邻核时，则便有 $(n+1)(n'+1)$ …个峰，而且谱线强度之比满足二项式展开的系数比。满足用 $2nI+1$ 或者 $n+1$ 规律来计算耦合裂分数的方法叫做“一级近似”。满足上述规律的谱图称为简单耦合谱或者一级耦合谱。

一维核磁共振谱 one dimensional NMR spectra 在 PFT-NMR 实验中，采集到的是随时间变化的自由感应衰减（FID）信号，进行一次傅里叶变换得到了以频率为横坐标，以谱峰的强度为纵坐标的谱图，称为一维 NMR 谱。为了研究体系在改变温度、改变浓度、改变 pH 值、不同反应时间或等待时间（如弛豫时间、脉冲宽度的测定）等系列实验条件下的谱学行为，对每次实验所检测到的 FID 信号皆作一次傅里叶变换记录所得到的谱线线簇亦归于一维 NMR 谱。

一致性因子 goodness of fit；GOF 对晶体结构进行最小二乘修正时，输出文件中常见的一种品质因子。*GOF* 的定义为

$$GOF=\sqrt{\frac{\sum w\left(|F_o|-|F_c|\right)^2}{n-m}}$$

式中，w 是相应衍射的加权因子；$|F_o|$ 和 $|F_c|$ 分别是衍射的实测和计算结构振幅；n 是实测衍射的数目；m 是在最小二乘法中被修正的结构参变量的数目。*GOF* 的期望值是 1，当采用了合理的加权方案时，*GOF* 将趋向于期望值。

伊文思图 Evans-diagram 表示阳极和阴极的电位和其真实电流密度曲线的理论图。阳极和阴极的两电位-真实电流密度曲线的交点代表自然腐蚀电位和腐蚀电流。

依附质子试验（APT 试验） attached proton test；APT 一个直接区分

指认化合物分子中—CH_3，—CH_2—、



属谱峰位置的方法。APT 方法也称为 J 调制法、自旋回波傅里叶变换（SEFT）法。最简单的 APT 的脉冲序列是：^{13}C 观测核 90°$_x$ 脉冲 $-\frac{1}{J_{CH}}$-AQ（采集 FID），同时对^{1}H 进行全去耦，惟在 $1/J_{CH}$ 期间不去耦。在这个脉冲序列作用下，记录的^{13}C 谱是质子去耦谱，每种碳原子呈现单峰，并且有核的欧沃豪斯增强效应，可提高灵敏度。在^{1}H 不去耦的 $\frac{1}{J_{CH}}$（τ）时间内，由于 J_{CH} 的耦合的调制作用使这 4 种碳的信号强度在采集 FID 时分为两组：>CH—、—CH_3 基团碳信号为最大负信号，而 >C<、—CH_2—基团碳为最大正信号。利用 4 种基团碳的化学位移分区的知识便可直接指认这 4 种基团上所连接氢的数目。为了克服不同化学位移的基团的峰的相位不一致，在 τ 时刻结束后对^{13}C 插入一个 180°脉冲再等待 τ 时间，这样接收到的是经化学位移重聚焦的自旋回波信号。

仪器分析 instrumental analysis 以物质的物理和物理化学性质为基础的分析方法称为物理和物理化学分析法。由于这类分析方法都需要较特殊的仪器，故常称为仪器分析法。它包括了各种光学分析法、电学分析法、热分析法、色谱法以及质谱、核磁共振、X 射线、电子显微镜和毛细管电泳分析等。

仪器微型化 miniaturization of instruments 仪器微型化有双重含义：不但表达仪器尺寸的缩小，而且还表征仪器工作时所需的试样量微小。由于现代分析仪器不但已广泛用于生产线在线分析、野外现场分析、医院临床和病人随身监测等领域，而且在航空航天、遥控遥测等领域日益广泛应用，因此便携、轻巧，甚至受到严格的体积、重量限制的分析仪器需求快速增长；在生物、医学、纳米科技等领域，由于试样难以获取，要求发展所需样品量极微小的分析仪器呼声日益高涨，可对微升甚至纳升、微克甚至纳克级实现准确可靠分析检测的微型化仪器得到广泛重视和长足发展。

仪器误差 instrumental error 由于仪器本身未经过严格校正、未调整到最佳工作状态、稳定性不好、长期使用引起的精度下降等原因引起的误差。

仪器中子活化分析 instrumental neutron activation analysis; INAA 又称非破坏性中子活化分析。是一种非破坏性中子活化分析技术。将标准和样品同时用相同通量的中子流辐照相同的时间，并经相同的适当时间的衰变后，用 Ge（Li）探测器检测和多道脉冲分析器直接进行分析，用峰值能量进行定性分析，峰面积做定量分

析。方法的优点是不必破坏样品，可同时测定 20～30 种元素，易于实现自动化。参见**中子活化分析**条。

胰癌胚抗原 pancreatic oncofetal antigen; POA 是产生于胎儿胰腺和胰腺癌组织中的一种癌胚抗原。分子量 85 万，为糖蛋白。在胰腺癌病人、胎儿、孕妇及某些良性肿瘤病人血清中增高。

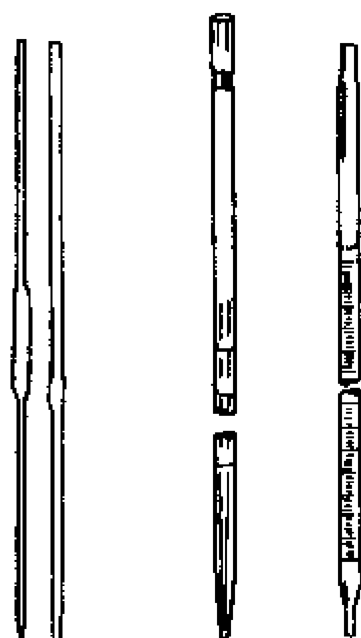
胰岛素 insulin 脊椎动物胰腺中兰氏岛（Yangerhans）的 β 细胞分泌的激素。1921 年由 F. G. Banting 和 G. H. Best 所发现。胰岛素可用酸性乙醇从胰腺中提取。1926 年 J. J. Abel 已经分离出胰岛素结晶，结晶中含有微量锌，单体分子量为 5700，在中性溶液中可相互融合。F. Sanger 首先确定了牛胰岛素的氨基酸排列顺序。胰岛素是通过 S-S 键在两处把 A 链（含有 N 末端以甘氨酸、C 末端以天冬酰胺结束的 21 个氨基酸残基）和 B 链（由 N 末端由苯丙氨酸和 C 末端为丙氨酸的 30 个氨基酸的残基构成）连接起来。在 A 链内有一个二硫键（S-S）。牛、猪、羊、马、鲸等动物的胰岛素，链中特定部位的残基并不相同，有种属差异。单独的 A 链和 B 链并不具有活性，在 S-S 键正确地将两链连接后才产生活性。在 β 细胞中最先合成的称为胰岛素原，它是由 86 个氨基酸（人、牛的为 81 个）组成的一条链的前身，在蛋白酶的作用下，去掉肽链的一部分便形成胰岛素分子而分泌到血液中。胰岛素的分泌受葡萄糖等的刺激，对物质代谢的调节起着重要作用。胰岛素可用于治疗糖尿病。

胰岛素受体 insulin receptor 由位于靶细胞膜表面，由两条重链（α-亚基，分子质量约为 135ku）及两条轻链（β-亚基，分子质量约为 90ku）组成的一种糖蛋白。胰岛素分子与胰岛素受体的特异结合及相互作用形成胰岛素-受体复合物，激活细胞膜，通过信使系统调节细胞内各种酶活性，继而产生一系列的生物效应，这些受体的数目与其接触的胰岛素浓度呈现相反的改变。研究发现，某些Ⅱ型糖尿病患者中，胰岛素分泌过多，机体对胰岛素产生抗性；某些抗糖尿病药物，能使细胞受体数目增加，而改善机体的胰岛素抗性。

胰凝乳蛋白酶 chymotrypsin 一种蛋白酶，脊椎动物的消化酶。在胰脏中以酶前体物质胰凝乳蛋白酶原的形态生物合成，随胰液分泌出去，在小肠受到胰蛋白酶和胰凝乳蛋白酶的一定分解，转变成活性的胰凝乳蛋白酶，属于肽链内切酶。牛的 α-凝乳蛋白酶的氨基酸残基数是 245 个，分子量约 2.5 万，第 57 位组氨酸、102 位天冬氨酸，195 位丝氨酸等三个残基在催化过程中起着中心作用。195 位丝氨酸受二异丙基氟磷酸（DFP）的作用经特异的修饰而丧失活性，即所谓丝氨酸蛋白酶，与同样在胰脏里合成的胰蛋白酶虽然在结构和催化机制方面关系非常密切，但底物特异性完全不同。

移动极差 moving range 相邻两测量值之差的绝对值，记为 R_s。当每一批产品或每一抽样时间间隔内只能获得样品的一个测量值，无法求得极差，更无法计算标准偏差，但可以计算移动极差 R_s，以便制作单值-移动极差质量控制图，用以控制产品质量。

移液管 pipet 用于准确转移一定体积液体的量出式玻璃量器。常见的有容量移液管［简称移液管，参见图(a)］和刻度移液管［参见图(b)］。前者的中部有一膨大部分，管颈上部刻有一圈形标线，此标线的位置由放出纯水的体积所标定。常用移液管的容积有5，10，25，50ml多种。按规定，移液管上应有下列标志：生产厂名或商标、标称容量(ml)、标定温度（20℃）、量出式符号（Ex）、精度级别（A或B）。移液管产品按其容量精度分为A级和B级。国家规定的容量允差和水的流出时间见表。


(a) 容量移液管　(b) 刻度移液管

常用移液容管的规格
（引自国家标准 GB 12808—91）

标称容量/ml		5	10
容量允差/ml	A	±0.015	±0.020
	B	±0.030	±0.040
水的流出时间/s	A	15～25	20～30
	B	10～25	15～30
标称容量/ml		25	50
容量允差/ml	A	±0.030	±0.050
	B	±0.060	±0.100
水的流出时间/s	A	25～35	30～40
	B	20～35	25～40

遗传工程技术 genetic engineering 又称DNA重组技术。采用人工手段将不同来源的DNA片段连接在一起来达到改变生物基因型和获得特定基因产物的目的。重组DNA涉及外源基因与载体的重组。外源基因的来源主要有两条途径：一是用限制性内切酶从基因组DNA中切割和分离所得，另一是从组织mRNA逆转录成cDNA，再制备双链DNA。重组DNA可以在细菌、酵母或哺乳类细胞中表达出特定的基因产物。遗传工程技术的主要途径是：（1）制备那些天然存在、量很少和稀有而人工难以大量制备的重要活性蛋白质；（2）改良动植物品种；（3）基因治疗。

遗传算法 genetic algorithms; GAs 模拟自然界生物"优胜劣汰"进化机制进行寻优的一种算法。1960年由J. H. Holland提出。在遗传算法中，将研究体系的响应曲面看作一个

群体，响应曲面上的每一个点作为群体中的一个个体，个体用多维向量或矩阵来描述，组成矩阵和向量的参数（元素）相应于生物中组成染色体的基因，染色体用固定长度的二进制位串表示，通过基因（参数）交换、突变（改变参数）等基因操作，在参数的一定范围内随机搜索，不断改善数据结构，构造出不同的向量，得到不同的解，目标函数值较优的解被保留，淘汰目标函数值差的解，最后得到最优的解。它可以越过位垒，跳出局部较优的试验点，是一种全局最优化方法。

乙二胺四乙酸 ethylenediaminetetraacetic acid 简称EDTA。一种重要的、应用广泛的螯合剂。由于在水中溶解度较小（22℃时溶解度仅为0.2mg·ml^{-1}）不便使用，常用其含两个结晶水的二钠盐，亦简称EDTA。它为白色固体，22℃时水中溶解度为111mg·ml^{-1}。由于每个EDTA分子中包含了六个可配位的原子，它几乎能与所有的金属离子形成稳定的配（螯）合物，且配位比简单（绝大多数为1∶1）。分析工作中，EDTA及其衍生物是最普遍采用的配位滴定剂、掩蔽剂。

乙酰值 acetyl number 亦称酯化度，以γ表示。在醋酯纤维制造过程中纤维素分子上每百个葡萄糖单元中羟基上氢原子被乙酰基（CH_3CO—）所取代数的一种表示方法。例如，纤维素三醋酸酯$[C_6H_7O_2(CH_3COO)_3]_n$的理论乙酰值为300。但这样的纤维素三醋酸酯不溶于丙酮，能在丙酮中直接溶解的醋酸酯的$\gamma=250$，为了使它能直接溶解必须将纤维素三醋酸酯经过局部水解以降低γ值。另一种是以CH_3COO—的含量百分数表示，纤维素三醋酸酯理论值（3×60/288）约为62.5%。在醋酯纤维的制造中，常用乙酰值判断纤维素三醋酸酯是否可溶于丙酮，以便于下道工序使用。

异常透射形貌术 anomalous transmission topography 以单色X射线为入射辐射，利用异常透射效应测定晶体内部缺陷的形貌术。用一束X射线照射高度完整的晶体，且晶体的线性吸收系数μ和X射线通道长度t的乘积达到20时，一般情况下，全部入射X射线应被晶体所吸收，透射光强度为零。但是，当入射角严格地符合布拉格角时，会在透射和衍射方向出现一定强度的两束射线，它们的强度大致相等，这种现象称为异常透射效应或Bormann效应。当晶体存在缺陷时，异常透射效应消失，射线将被完全吸收，因而会在透射图上出现缺陷的影像。

异常值 outlier 位于约定显著性水平下所允许的合理误差范围之外的测量值。在一组测量值中，有个别的测量值比其余的测量值明显地偏大或偏小，此称为离群值。它有可能只是随机波动的极度表现，但仍处在统计上所允许的合理误差范围内，此为极值；若位于统计上所允许的合理误差范围之外，则为异常值。在国标GB 4883—85中规定，一组测量值中与

平均值的偏差超过两倍标准差的测量值称为异常值，将与平均值的偏差超过三倍标准差的测量值，称为高度异常的异常值。在处理数据时，应剔除高度异常的异常值。异常值是否剔除，视具体情况而定。在统计检验时，指定为检出异常值的显著性水平 $\alpha=0.05$，称为检出水平；指定为检出高度异常的异常值的显著性水平 $\alpha=0.01$，称为舍弃水平，又称剔除水平。但在分析测试实践中，通常将异常值剔除，或者虽不剔除，但不参与数据处理和运算。

异常值检验 test of outlier 对一组测量值中的离群值进行统计检验以确定其是否为异常值。在分析测试中，常用的检验异常值的方法有 Q 舍弃法，狄克松检验法，格鲁布斯检验法、极差检验法等。

异核化学位移相关谱 Heteronuclear chemical shift correlated spectroscopy 直接全面地反映化合物分子中各个特定 δ 的 ^{13}C（对于 ^{13}C—H 体系）与其键联的特定 δ 的 ^{1}H 相关性，相当于一整套对 ^{1}H 选择性去耦的碳谱。脉冲序列如下

$$^{1}\text{H 核}\quad 90^\circ_x - \frac{t_1}{2} - \frac{t_1}{2} - \tau_1\left(\frac{1}{2J_{CH}}\right) - 90^\circ_x - \tau_2\left(\sim\frac{1}{3J_{CH}}\right) - {}^{1}\text{H 去耦}$$

$$^{13}\text{C 核}\quad —180^\circ——————90^\circ_x——————\text{采集 FID }(t_2)$$

在演变期中间对 ^{13}C 加 180°脉冲，重聚异核耦合，相当于对 ^{13}C 去耦。随后的固定的延迟 $\tau_1\left(\frac{1}{2J_{CH}}\right)$ 使质子的两个磁化分量在混合期 90°脉冲到来时刚好转到反平行位置，为磁化转移创造最佳条件。90°脉冲同时分别作用于 ^{1}H 和 ^{13}C，出现了单量子相干及实现从 ^{1}H 到 ^{13}C 的相干转移，增强了 ^{13}C 的灵敏度。再经 τ_2 延迟时间，使受到质子化学位移调制的磁化分量基本同相，并在 ^{1}H 去耦的情况下检测（CH_n）的信号，获得 ^{1}H 化学位移为纵轴，^{13}C 化学位移为横轴的异核二维相关谱。位置处于[$\delta(^{1}\text{H}),\delta(^{13}\text{C})$]的谱峰，意味着与该组化学位移对应的基团上的 ^{1}H 与 ^{13}C 是直接键联的。常用于不易指认各种基团所属谱峰，不便找出基团之间的联系的密集的 ^{1}H 谱，^{13}C 谱的区域。

异核接力相关谱 heteronuclear relayed coherence transfer spectroscopy 本实验是基于 $^{3}J_{HN}$，$^{1}J_{CH}$ 耦合关系，通过 $^{1}\text{H}\to{}^{1}\text{H}\to{}^{13}\text{C}$ 相干转移得到谱线的归属以及碳-碳连接的信息，基本脉冲序列

$$^{1}\text{H 核}\quad 90^\circ - \frac{t_1}{2} - \frac{t_1}{2} - 90^\circ - \frac{\tau_m}{2} - 180^\circ\left(\frac{\tau_m}{2} - \tau_1\right) - \tau_1 - 90^\circ - \tau_2 - \text{去耦}$$

$$^{13}\text{C 观测核}\quad —180^\circ——————180^\circ——————90^\circ—\text{采集 FID }(t_2)$$

考虑一个 AMX 三旋自旋体系，如 ^{12}CH(A)-^{13}C(X)-H(M)，$^{3}J_{HH} \ll {}^{1}J_{CH}$，$^{2}J_{CH}\approx 0$。到第二个 90°脉冲实现了 A→M 的磁化转移，

$$\frac{\tau_m}{2} - 180° - \frac{\tau_m}{2}$$

可重聚质子化学位移和异核耦合作用，保留同核耦合作用。对^{13}C用180°脉冲翻转^{13}C核自旋态，使得在混合期的末期存在着异核耦合作用，作用时间为$\tau_1\left(\frac{1}{2^1J_{CH}}\right)$。经过最后既对$^1H$又对$^{13}C$的两个90°脉冲，出现了从M→X的磁化转移，经$\tau_2$时间使反相量达到同相，在质子去耦时检测信息。

异核联锁 heteronuclear lock 被测核和控制锁场核是不同核素，比如被测核为^1H等，控制锁场核为^2D、^7Li、^{19}F等。控制系统与测量系统的频率相差大。NMR谱仪一般采用异核内锁与异核外锁。参见**场频联锁**条。

异核欧沃豪斯效应相关谱 heteronuclear Overhauser effect spectroscopy；HOESY 利用核欧沃豪斯效应可找到空间位置相近的两种核素之间的关系。脉冲序列

^1H核：$90° - \frac{t_2}{2} - \frac{t_2}{2} - 90° - \tau_m$ - 去耦

^{13}C或其他核：— 180°— 90°—采集FID

前两个90°脉冲期间使^1H的横向磁化矢量产生纵向分量。在τ_m期间发生^1H与^{13}C或其他核素之间的交叉弛豫。最后一个对^{13}C或其他核的90°脉冲将^{13}C核或其他核的纵向磁化矢量转成可检测的横向磁化矢量。它将含有特定的^{13}C核或其他种核与^1H核产生核欧沃豪斯效应时出现的NMR信号。在HOESY谱中表现为在该氢核的化学位移与该^{13}C核或其他种核的化学位移两坐标交叉位置出现交叉峰。

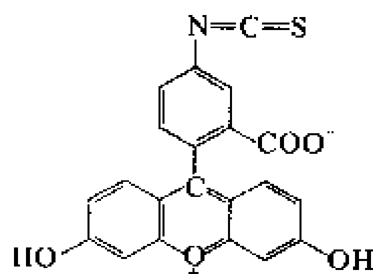
异核自旋回波*J*调制 heteronuclear spin echo *J* modulation 对于$I=\frac{1}{2}$的二核自旋体系HX观测X核，其实验方法有两种：质子倒转法和门控去耦法，分别为a和b，它们的观测脉冲皆为普通的回波脉冲，只是对^1H的辐照方式略有不同。异核体系中180°，脉冲施加于X核，对^1H核不起作用，要使^1H核的状态交换，必须另外同时对^1H核施加180°脉冲，结果与同核体系自旋回波*J*调制相同，此即质子倒转法。而质子门控去耦法是在脉冲序列的第2个τ时间间隔内施加质子去耦，因此X核的两个磁化分量都以ν_X频率运动，到达2τ末，它们保持第1个τ时间末了的相位$\pi J\tau$和$-\pi J\tau$，故其夹角只有质子倒转实验的一半。自旋回波的振幅受$\cos(\pi J\tau)$的调制，自旋回波的幅度M_y^0为无耦合时的最大回波幅度的$\cos(\pi J\tau)$倍。这是*J*分解谱的基本原理之一。参见**同核自旋回波*J*调制**条。

异核总相关谱 heteronuclear total correlation spectroscopy 通过总相关谱实验进行^1H-磁化转移，随后接着为不灵敏核的极化转移增强法（INEPT）实验，获取包括异核在内的整个自旋体系的相关。其缺点是由于极化作用的布居分布导致信息的强度增减不一致。参见**总相关谱**条。

异离子效应 diverse ion effect 亦

称异盐效应（diverse salt effect）。通常异离子盐（不含有平衡所涉及的同离子）的存在，将引起弱电解质离解或沉淀溶解度的增加。这是由于阴、阳离子间的相互吸引作用有效地屏蔽了平衡反应中的诸离子，减小了它们的有效浓度（活度），使平衡产生移动。异离子的浓度或电荷增加，通常异离子效应增大。可以通过异离子盐存在时，溶液中离子强度和离子活度以及对平衡常数影响的计算，定量描述异离子效应的大小。

异硫氰酸荧光素 fluorescein isothiocyanate；FITC 分子式 $C_{21}H_{11}NO_5S$。很久以来一直被用作抗体的荧光标记试剂。与苯异硫氰酸盐相似，在碱性条件下与蛋白质、肽的氨基酸反应生成相应的衍生物。利用异硫氰酸荧光素的氨基酸衍生物荧光素乙内酰硫脲进行荧光检测，可以测定皮摩尔量级。



异相动力学 heterogeneous kinetics 电荷在电极/溶液间传递的动力学。

异相化学发光 heterophase chemiluminescence 反应物状态不一致的化学发光称为异相化学发光。它包括气体与固体、液体与固体或互不相溶的两个液体表面之间产生的化学发光现象。异相化学发光的第一个分析应用，可能是通过测量臭氧与吸附在硅胶片上的罗丹明B之间的化学发光而进行臭氧的测定。

异盐效应 diverse salt effect 见**异离子效应**条。

异种移植 xenograft（xenogeneic graft） 是指不同种属间的移植，其遗传基因类型完全不同。例如将动物的肾脏或皮肤移植给人，此类移植目前尚无长期存活的报道。

抑菌商数 inhibitory quotient；IQ 由于抗菌药物在体液和组织液中的浓度，往往只是血液中浓度的 $^1/_{10}$～$^1/_2$，所以，以最小抑菌浓度（MIC）小于血清治疗浓度作为对抗菌药物敏感的指标是不确切的。临床上选择抗菌药物，常根据抑菌商数来决定。抑菌商数是抗菌药物在局部组织或体液中的浓度除以该抗菌药物的MIC。IQ值愈大，抑菌效果愈好；反之则愈差。

抑制器 suppressor 在离子色谱中，用来降低流动相背景电导的装置。将它置于电导检测器之前，流动相先通过抑制器与再生剂相互作用，使淋洗剂转变成电导率低的化合物形式，达到降低流动相背景电导，提高检测灵敏度的目的。抑制器有柱抑制器（抑制柱）、中空纤维抑制器、微膜抑制器和电解抑制器等，它们的工作原理略有差异。

抑制褪色光度法 inhibition discoloring spectrophotometry 利用被测组分对某褪色反应的抑制作用，利用光度法定量的方法。例如，过

二硫酸钾可氧化罗丹明 B 使其褪色（550nm 处的吸光度降低），Ag^+ 可以催化此反应使吸光度进一步迅速降低，而维生素 C 对 Ag^+ 的催化作用，又使吸光度回升，而回升的量在一定条件下与维生素 C 的浓度线性相关，据此可测定痕量维生素 C。

抑制型电导检测 suppressed conductance detection 在离子色谱中，当采用背景电导高的电解质溶液作流动相时，先通过化学反应或离子交换等方法将柱流出物中淋洗剂转变成电导率低的弱电解质后再导入检测池进行电导测定的方法。强电解质流动相不仅背景电导高，而且使被测离子以盐的形式存在，检测灵敏度很低，甚至根本无法检测，采样抑制技术将背景电导降低的同时往往可以将被测物转变成电导率更高的形式，如从盐转变成相应的酸，从而大大地提高检测灵敏度。

抑制型离子色谱法 suppressed ion chromatography; SIC 又称双柱离子色谱法。是在柱流出物进入检测器之前通过化学抑制等方法将较高的流动相背景电导降低到一定程度后再进行电导检测的离子色谱法。例如，当以强电解质（如碳酸盐）作流动相分析无机阴离子时，流动相背景电导很高，难以直接检测到被测阴离子或检测灵敏度很低，如果将柱流出物通过一个抑制器，使流动相中被测离子的反离子（阳离子）得以除去，流动相的背景电导就会大大降低，同时被测阴离子在抑制器中转变成灵敏度更高的酸形式，从而获得很高的检测灵敏度。因为离子色谱发展初期的抑制器是与分离柱类似的柱形抑制器（抑制柱），柱内填充与分离柱填料带相反电荷的离子交换树脂，因而早期又称双柱离子色谱法。

抑制柱 suppressed column 外形和分离柱相同的柱形抑制器。这是最早使用的离子色谱抑制器。抑制柱内填充的离子交换树脂是与分离柱带相反电荷的离子交换树脂。在阴离子交换色谱中，抑制柱接于阴离子交换分离柱后，抑制柱内填充的是强酸性 H 型阳离子交换树脂，称阳离子抑制柱。抑制柱虽然交换容量较大，但不能连续再生，使用一段时间后须再生处理或更换，操作比较麻烦。

逸出功 work function 将一个电子从样品的费米能级移到真空能级克服势垒所必须消耗的功。每一种材料都有逸出功，其值主要由材料的性质所决定，是材料发射电子能力的一种量度，一般低逸出功的物质容易发射出电子。

逸出气分析 evolved gas analysis; EGA 在程序控制温度下，测量从物质中释放出的挥发性产物的性质和数量与温度关系的一种技术。该法可用于测定试样中有机碳含量、有机碳的逸出速率和温度的关系以及高聚物中添加剂的含

量等。

逸出气检测法 evolved gas detection; EGD 在程序控制温度下，定性检测从物质中逸出挥发性产物与温度关系的一种技术。该法主要用于研究升温时的解吸过程和分解机理，根据所测得的解吸谱，除可判断吸附状态种类、吸附量和解吸能之外，还可判断是分子吸附或解离吸附。

逸度 fugacity 实际气体的状态方程形式多样而复杂，因此用它们得不出统一的化学势表示式，这样就使得热力学处理非理想系统时会得到复杂而形式多样的结果。按照Lewis的建议，将压力改写为逸度、之后，使所有实际气体的化学势与理想气体有了相同的表示形式，因而可以把逸度看做校正后的压力，即校正压力 $f=\gamma p$，其中校正因子 γ 称为逸度系数。

溢流区 flooded zone 在毛细管色谱中，进样时大量溶剂进入色谱柱后，溶剂会沿柱内壁伸展开一段长度，称这段区间为溢流区。同时溶剂也起到临时固定相作用，挥发性较低的组分会在一段柱内分布，使得进样谱带变宽，称这种现象为空间性谱带加宽（band broadening in space），溶剂与固定相兼容则溢流区较小，若不兼容则溢流区较大，因此所选的样品溶剂要与固定液的极性相匹配。

因素 factor 又称因子。是影响试验指标的要素或原因。例如，考察燃气流量、助燃气流量、燃烧器高度对火焰原子吸收光谱法测定水中铁吸光度的影响，吸光度是试验指标、影响吸光度的燃气流量、助燃气流量，燃烧器高度等则为因素。因素水平的变化引起试验指标的变化。

因素间交互效应 factors interaction 在试验中两个或多因素联合起作用对试验指标产生的附加影响。它不是因素之间不同水平组合时所产生的总效应，因为总效应中除了因素之间的交互效应之外，还包括了各因素的主效应。如在火焰原子吸收光谱分析中，调节燃气流量，吸光度改变了 A_1，调节空气流量，吸光度改变了 A_2，此时 A_1 和 A_2 分别为燃气和空气流量的主效应。如果同时调节燃气和空气流量，吸光度改变了 A_3，此时 A_3 为同时改变燃气和空气流量所产生的总效应。燃气和空气流量的交互效应则为 $\Delta=A_3-(A_1+A_2)$。

因素水平 level of factor 影响试验指标的因素所处的状态。如考察试剂浓度对产率的影响，产率为试验指标，试剂浓度即为因素，试剂浓度 $1\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$、$1.5\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 则为因素的两个水平。因素水平（试剂浓度）的变化引起试验指标（产率）的变化。

因素效应 factor effect 所研究因素对试验指标的影响。它包括因素的主效应、因素之间的交互效应，前者是在无因素之间相互作用

时可控因素本身水平变化引起的试验指标值的变化，后者是共存元素之间的协同或抵偿作用引起的试验指标值的变化。随机因素对试验指标的影响归为试验误差效应。

因子分析 factor analysis 一种多元统计分析方法。因子分析模型最早由 J. Pearson 和 C. Spearman 提出，首先用于心理学研究。20 世纪 50 年代末和 60 年代初开始用于化学领域，逐步形成了带有浓厚化学特色的因子分析方法，通过对一数据矩阵进行特征分析、旋转变换等操作，研究和分析复杂的或是数据量庞大的测量数据以确定影响这些数据的因子数，获得对测量数据的定性和定量解释。R. M. Wallace 首先用矩阵求秩法确定混合物中吸光物种数。因子分析引人化学领域，是化学家能够解决许多过去无法解决的复杂的多变量的问题。它可以用最少的因子数来表征大量、复杂的测量数据，而基本上不损失数据原来所包含的信息，并能对因子给出有明确物理与化学意义的解释，通过目标检验可进一步进行定量研究。它在分析化学中有着广泛的应用。

因子分析分光光度法 factor analysis spectrophotometry 采用因子分析技术处理复杂多组分体系光度数据的一种分析方法。这种方法一般先对吸光度数据矩阵进行因子分析，找出主因子数，然后对可能存在的组分进行投影迭代计算和检验，逐步得到被测组分定性和定量分析方面的信息。因子分析法目前常被称为迭代目标转换因子分析法（IT-TFA），这种方法能较好地解决复杂多组分体系的分析。

阴极 cathode 发生还原反应的电极。

阴极溅射 cathode sputtering 载气离子在电场作用下高速撞击阴极，使原子从阴极表面晶格中逸出的过程。若带电粒子的动能足以克服金属阴极表面的晶格能时，当它撞击阴极表面，就能将原子从晶格中溅射出来，形成自由原子蒸气。它已被用于空心阴极光源与非热激发的阴极溅射原子化器。

阴极去极剂 cathodic depolarizer 见去极剂条。

阴极溶出伏安法 cathodic stripping voltammetry 电解富集过程是电氧化，溶出测定过程是电还原的溶出伏安法。用于测定由溶液中阴离子和电极材料组成的难溶盐中的阴离子和有机生物分子。

阴极荧光 cathode fluorescence 具有一定能量的电子束轰击样品时辐射出的可见光、红外或紫外光叫阴极荧光。它是由物质的价电子在激发态与基态之间能级跃迁直接释放的能量所产生的。

阴极荧光像 cathode fluorescence image 利用阴极荧光所得的扫描电子像叫阴极荧光像。

阴离子交换剂 anion exchanger 具有阴离子交换功能基团的离子交换

剂。其功能基团可以离解出阴离子（如 Cl^-）与样品阴离子进行离子交换反应。最常见的阴离子交换剂的功能基团是季铵基。

阴离子交换色谱法 anion exchange chromatography；AEC 以阴离子交换剂作固定相进行阴离子分离分析的离子色谱法。最常用的固定相是以季铵基为功能基团的阴离子交换剂，最常用的流动相是碳酸（氢）盐、有机羧酸盐。可以用于无机阴离子、阳离子的配阴离子、羧酸和烷基磺酸等无机和有机阴离子的分析。

阴离子交换树脂 anion-exchange resin 离子交换树脂（网状高分子聚合物）中的一类。这类树脂的活性基团是碱性的，它的阴离子可被其他阴离子交换。根据基团碱性的强弱，又分为强碱型和弱碱型两类。强碱型树脂含有季铵基[$—N^+(CH_3)_3Cl^-$]，可在碱性、中性和酸性溶液中使用；弱碱型树脂含有胺基（如伯、仲、叔胺基等），它们对 OH^- 亲和力大，不能在碱性溶液中使用。阴离子交换树脂主要用于阴离子的分离和富集。当把阴离子交换树脂浸在水中时，首先发生水化作用



$$R—NH_2 + H_2O \longrightarrow R—\overset{+}{N}H_3OH^-$$

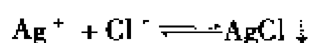
其中的 OH^- 再与其他阴离子发生交换作用



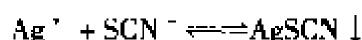
$$R—\overset{+}{N}H_3OH^- + Cl^- \longrightarrow R—\overset{+}{N}H_3Cl^- + OH^-$$

阴离子隐蔽剂 anion masking agent 能隐蔽阴离子的一大类试剂。常见的有各种阳离子、合适的氧化剂、还原剂等。参见**阳离子隐蔽剂**条。

银量法 argentimetry 一种应用广泛的沉淀滴定法。它是基于如下生成难溶银盐的反应



$$Ag^+ + Cl^- \rightleftharpoons AgCl\downarrow$$



$$Ag^+ + SCN^- \rightleftharpoons AgSCN\downarrow$$

利用这类反应的滴定法称为银量法。它可用于 Cl^-、Br^-、I^-、SCN^-、CN^- 和 Ag^+ 的定量测定。根据所用指示剂的不同，以创立者的名字又分为以铬酸钾作指示剂的摩尔（Mohr）法，以铁铵矾作指示剂的佛尔哈特（Volhard）法和采用吸附指示剂指示终点的法扬斯（Fajans）法。

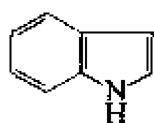
银-氯化银电极 silver-silver chloride electrode 在银丝（或银片）上镀上一层 AgCl，一般先把银丝（或银片）用 $3mol \cdot L^{-1}$ HNO_3 溶液浸洗，水洗后在 $0.1\ mol \cdot L^{-1}$ HCl 溶液中进行阳极极化，用此方法制作的电极浸在浓度一定的盐酸盐溶液中即构成 $Ag \cdot AgCl/Cl^-$ 电极，其电极反应为



$$AgCl + e \rightleftharpoons Ag + Cl^-$$

电极电势决定于氯离子的浓度，它具有容易处理、电位重现性好等特性，是常用的参比电极之一。

吲哚 indole 学名2,3-苯基吡咯。



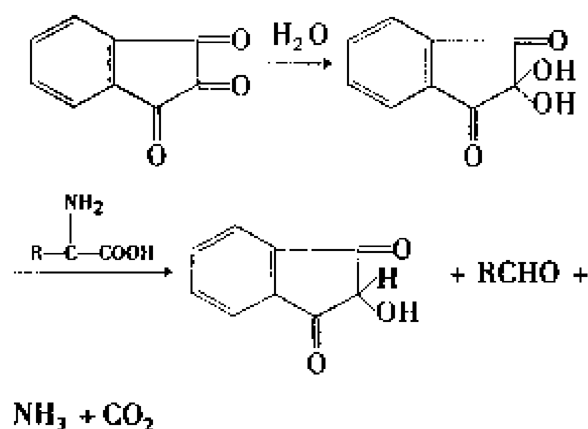
分子式 C_8H_7N，分子量117.15，熔点52℃。由J. Baeyer将靛青在锌粉中蒸馏得到的无色小叶状结晶。与吡咯一样不显碱性，而是弱酸性。亚胺基的氢可被碱金属置换成盐。吲哚具有难闻的臭气，但稀浓度下却发香气。存在于煤焦油中，蛋白质腐败后也产

生吲哚。其衍生物有色氨酸、靛蓝类染料等。

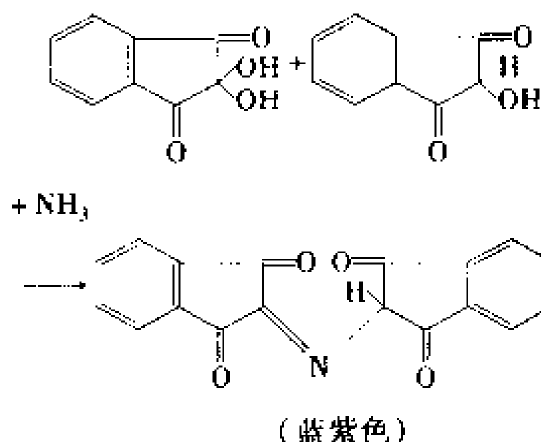
吲哚试验 indole test 用于鉴定某些细菌（如肠杆菌科的成员）的一种试验，即测定细菌分解蛋白胨中的色氨酸产生吲哚的能力。在蛋白胨或胰胨培养基中，细菌于37℃培养48h，然后加入Kovacs氏试剂，试管加塞振荡，如果存在吲哚，则溶解在试剂中变成粉红色或红色，并在培养基表面成为一层。

饮料分析与检验 beverage analysis and inspection 主要是确定饮料是否符合质量标准和规定的饮用标准，涉及营养成分、限制成分、卫生及污染情况等几方面。它包括：原辅料、甜味剂、其他添加剂、防腐剂、合成色素的分析；蔗糖、糖精含量的测定；特殊成分或有效药物成分含量的测定。

茚三酮比色法 colorimetric method with ninhydrin 一种测定氨基酸含量的方法。在碱性条件下，氨基酸（除脯氨酸外）能与水合茚三酮作用，生成蓝紫色化合物，最大吸收波长为570nm，可用分光光度法测定样品中的氨基酸含量，反应式如下



$NH_3 + CO_2$

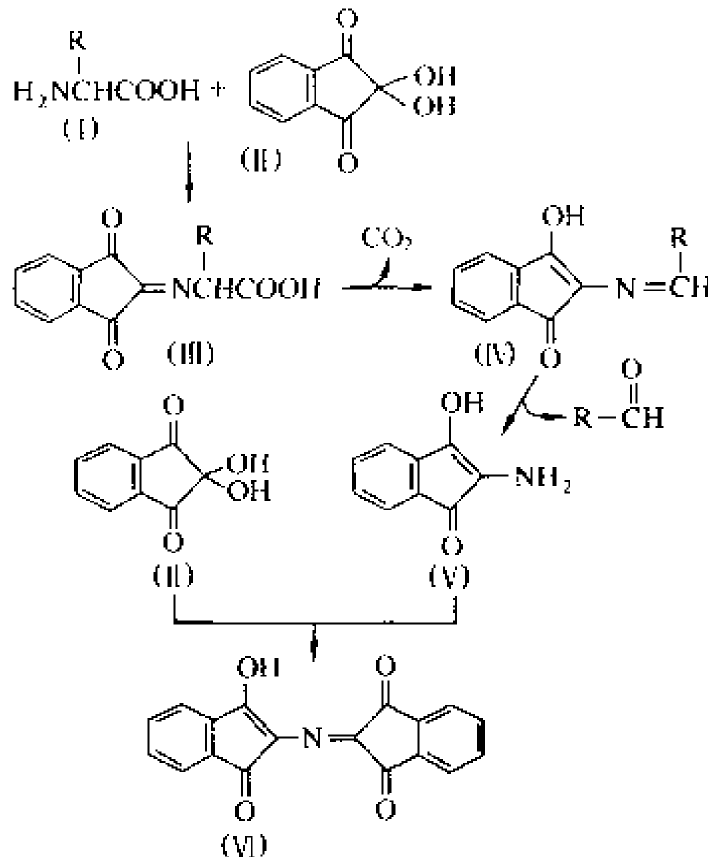


（蓝紫色）

茚三酮反应 ninhydrin reaction 具有胺基的化合物Ⅰ与茚三酮Ⅱ反应生成酮亚胺Ⅲ。酮亚胺脱碳酸后生成醛亚胺Ⅳ，再脱醛生成胺中间体Ⅴ。Ⅴ与另一分子的茚三酮反应生成红紫色的化合物Ⅵ，这一反应称为茚三酮反应。反应如下：

该反应主要用于氨基酸、肽的吸光、荧光定量测定。与具有伯胺基的氨基酸、肽反应时，酮亚胺脱氢，最大吸收波长570nm。随氨基酸侧链的不同颜色略有差异，含ε氨基侧链的颜色很淡。脯氨酸或羟基脯氨酸等亚氨基酸反应时生成黄色物质，最大吸收波长在440nm。只在低pH时反应性增强呈红色。溶液中的反应有S. Moore，W. H. Stein等提出的氯化锡（Ⅱ）法及用抗坏血酸还原茚三酮后得到的还原茚满三酮的方法；E. W. Yemm，E. C. Cocking提出的KCN法等。肽类事先用碱加水分解后再测定灵敏度高。以纸色谱、薄层色谱测定时可以用0.2%～2%的茚三酮-丙酮或丁醇溶液喷雾。用镓-茚三酮进行定量灵敏度高；用4-乙基-2-甲基吡啶-茚三酮时随氨基酸的不

同产物颜色不同，可以进行同时分析。



应力分析 stress analysis 利用多晶X射线衍射技术测定试样表面层残余应力的分析方法，是一种非破坏性的应力分析方法。试样表面层的应力包括由于塑性变形不均匀或曾有温度梯度等引起的宏观应力和由于形变、相变、多相物质的膨胀等因素引起、存在于试样内各晶粒之间或晶粒之中的微观应力。试样表面层的宏观应力是通过测定同一晶面族在不同指向的晶粒中晶面间距的变化量求得的。而微观应力的确定则是通过对衍射峰的峰形分析来完成的。由于微晶的晶粒大小和微观应力都能引起衍射峰的宽化，当两种效应同时存在时，如何使两种效应有效地分离，就成为保证测量结果准确性的关键。

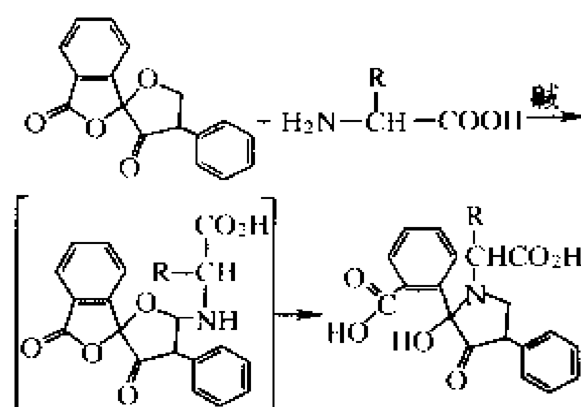
迎头色谱法 frontal chromatography 又称前沿色谱法。参见**前沿色谱法**条。

荧光 fluorescence 光致发光的一种。在分子或原子吸收光被激发后再以光的形式辐射能量的过程中，如果发光最初的状态与发光结束时的状态其电子多重度相同，则称为荧光。通常荧光是从第一激发单线态 S_1 回到基态单线态 S_0 的光辐射。一般有机分子的基态都是单线态，吸光后从基态最低振动能级跃迁至第一激发态或更高电子能级的各振动能级。从高振动能级通过振动松弛失去能量回到低振动能级，再通过内转换过程回到同样多重态的低电子能级，从第一激发

单线态 S_1 返回时发荧光。由于发荧光可以回到基态的各振动能级，当 S_1 与 S_0 的振动波函数相似时，吸收光谱的第一吸收带与荧光光谱呈镜像对称。从 S_1 返回的过程除荧光外，还可以有回到 T_1 的系间窜越、通过内转换非辐射失活回到 S_0 等过程，因此往往使荧光量子产率降低。荧光过程的寿命一般在 $10^{-9}\sim10^{-7}$ s。$S_1\rightarrow S_0$ 长寿命的发光称为延迟荧光。可用激发光谱、发射光谱、量子产率、寿命、荧光偏振等参数描述荧光。荧光常用于痕量物质的高灵敏的定性定量分析。

荧光胺 fluorescamine 学名 4-苯基螺[呋喃-2(3*H*),1'-二苯并呋喃酮]-3,3'双烯。是胺基化合物的荧光衍生试剂。荧光胺及其水解产物本身不发荧光，与胺基的衍生产物却发强荧光（激发波长 390nm，发射波长 475nm）。在碱性溶液中与胺基反应迅速。灵敏度比茚三酮反应高 10～100 倍，用于滤纸上及溶液中氨基酸、肽的测定。

荧光胺衍生化法 fluorescence amine derivation 氨基酸或其他一些含氨基的化合物，本身无荧光。直接检测时灵敏度低。荧光胺为一种灵敏的氨基酸或伯胺的衍生化试剂，衍生化反应如下：



经衍生化后的氨基化合物具有强的荧光活性。可用于色谱分离中对这些物质的检测。在碱性介质中，衍生化反应十分迅速，过量的试剂水解成非荧光物质。它已经应用于许多氨基酸分析仪器中。

荧光薄层板 fluorescent thin layer plate 在薄层材料中加入一种发荧光物质后制成的一种特制的薄板，以便于观察无色组分（或无紫外吸收组分）的薄层色谱图。样品在荧光薄层板上展开后，在紫外光下观察时，板的本底发荧光，而样品组分点不发荧光和荧光较弱，因此可以看出点的位置。常用的荧光剂有硅酸锌、硫化锌镉、荧光黄、桑色素等。

荧光产额 fluorescent yield 在特征 X 射线的激发过程中，最终发射出的 X 射线光子数与最初产生的内层轨道空位数之比值。如果不存在俄歇效应，则荧光产额 ω 应该为 1，因而俄歇产率的定义为 $1-\omega$。K 系荧光产额 ω_K 是单位时间内发射的所有 K 系谱线的光子数除以同一时间内形成的 K 层电子空位数。L 系及 M 系荧光产额 ω_L 及 ω_M 的定义与此相同。荧光产额是随原子序数及谱系而变化的，低原子序数的元素的荧光产额较低，这是影响其测定灵敏度的因素之一。

荧光猝灭 fluorescence quenching 激发态的荧光分子通过各种外转换过程失去能量使荧光强度降低的现象。如果荧光物质以外的其他物质存在时使其荧光猝灭，则该物质称为猝灭剂。基态荧光分子与猝灭剂之间通过弱的结合生成复合物，使荧光猝灭的现象称为静态猝灭。而激发态荧光分子与猝灭剂碰撞使其荧光猝灭的现象称为动态猝灭。荧光分子本身浓度增大使其荧光猝灭的现象称为浓度猝灭或自猝灭。由于荧光的再吸收、荧光物质发生化学变化而观察不到荧光的现象一般不称为荧光猝灭。在利用荧光进行定量、液体闪烁计数等包含荧光过程的测定方法中，一定要注意溶剂、共存杂质、氧气等猝灭剂的影响。

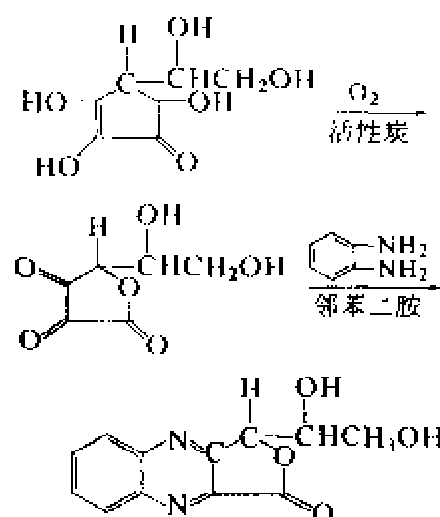
荧光猝灭分析 fluorescence quenching analysis 利用荧光猝灭作用对猝灭剂进行分析的方法。严格讲，猝灭过程常常伴随量子产率的变化，因此不应包含化学反应、内滤作用、荧光再吸收引起的荧光强度降低。但实际分析中经常利用弱分子间作用形成络合物导致的荧光强度降低进行荧光猝灭分析（激发前形成络合物导致的猝灭称为静态猝灭，激发后形成络合物导致的猝灭称为动态猝灭）。此外，化学反应导致的荧光强度降低虽不属于荧光猝灭，但也是常用的一种荧光猝灭分析法。如卤素离子、过渡金属对荧光体的猝灭作用常用于这些离子的荧光猝灭分析。

荧光淬灭剂 fluorescence quencher 在测定物质的拉曼光谱时，往往有荧光产生，由于荧光的强度比拉曼光强得多，所以一旦样品或杂质产生荧光，拉曼光谱就会被荧光所湮没，致使检测不到样品的拉曼光谱信号。加入荧光淬灭剂，是抑制或消除荧光干扰的方法之一。常用的荧光淬灭剂有硝基苯等，例如加入少量（≈1%）硝基苯，可以有效地淬灭荧光，从而测得高质量的拉曼光谱。

荧光定量法 fluorimetry; fluorometry 以一定激发光照射一定状态的荧光物质，通过定量测定荧光能量的变化对荧光物质，或通过该荧光物质对其他物质进行定量的方法。它是直接测定发射光的能量，因此通过提高检测器的灵敏度可以进行高灵敏度测定；由于发荧光的过程经历了吸光和发光两过程，因此其选择性要高于吸收光谱法。荧光测定的不利因素在于，直接测定荧光发射能量容易受仪器条件的影响，不便相互比较；分子激发态易受分子结构、反应、环境、温度及共存杂质的影响。对于弱荧光发射还容易与瑞利散射、拉曼散射相混。通过测定荧光分子的量子产率、荧光光谱、荧光偏振等的变化可以跟踪化学反应、结构变化、分子周围微环境的变化等。

荧光法测定维生素C含量 determination of vitamin C by fluorimetry 一种测定维生素C含量的方法。样

品经偏磷酸溶液匀浆提取后，用活性炭或2,6-二氯靛酚把还原型维生素C氧化成脱氢抗坏血酸，脱氢抗坏血酸与邻苯二胺反应生成有荧光的喹噁啉衍生物，在338nm激发波长、420nm发射波长下荧光法测定的维生素C的含量，加入硼酸可测定干扰物质的空白荧光强度。反应式如下



荧光光谱 fluorescence spectrum 常指荧光发射光谱，即荧光强度随荧光发射波长或波数变化的函数关系曲线。横坐标可用波长或波数，纵坐标可用荧光强度或光子数来表示。以单位波长的光子数表示时有

$E_q(\lambda)=dE_q/d\lambda(h\nu\cdot m^{-2}\cdot nm^{-1})$

以单位波数的光子数表示时有

$E_q(\lambda)=dE_q/d\nu[h\nu\cdot m^{-2}\cdot(cm^{-1})^{-1}]$

实质上这两种方法是以全波长或全波数段的积分荧光强度来表示，该值与荧光量子产率呈正比。一般实验测定得到的荧光光谱涉及分光器、检测器等固有的波长特性，为表观荧光光谱。凝聚态物质的荧光光谱一般与激发波长无关，反映物质真实的荧光特性。由于激发态分子的寿命容易受化学反应、与溶剂的相互作用的影响，因此荧光光谱比吸收光谱更能敏锐地反映分子的状态变化。

荧光检测器 fluorescence detector 利用某些物质（如芳香族化合物、生化物质）吸收一定能量（波长）的光之后，发射出比吸收波长更长的特征光（荧光）的性质所设计的检测器。它的灵敏度在$10^{-12}g\cdot ml^{-1}$，比紫外检测器要高2～3个数量级，特别适用于痕量分析。它对温度、流动相流速等实验条件不太敏感，使用非荧光溶剂作流动相时，能进行梯度洗脱。

荧光抗体技术 fluorescent antibody technique 一种间接应用荧光抗体（即用荧光染料所标记的某抗原的抗体）来检测抗原的方法。

荧光密螺旋体抗体吸收试验 fluorescent treponemal antibody absorption test; FTA-ABS 通过检测患者血清中抗梅毒螺旋体抗体来诊断梅毒病的特异性试验。首先用赖特螺旋体（非致病性的）提取物处理血清，以便吸收出特异性抗体；然后应用杀死的梅毒螺旋体固定于载玻片上，加入上述处理血清作用，水洗后加上荧光标记的抗人体球蛋白血清，以显示与螺旋体反应的抗体。该试验较FTA200试验更具特异性和更加敏感，现已用该法取代之。

荧光偏振 fluorescence polarization 在偏振光激发下，荧光体发射的荧光亦是偏振光。在平行和垂直于激发光

偏振方向所观察到的荧光强度$I_{//}$和$I_{\perp}$是不同的。荧光偏振可以用荧光偏振度P和各向异性r来度量。$P=(I_{//}-I_{\perp})/(I_{//}+I_{\perp})$；$r=(I_{//}-I_{\perp})/(I_{//}+2I_{\perp})$。荧光偏振与荧光体的分子形状、转动速度；与荧光体的吸光对偏振激发的取向、光选择性、激发矩与发射矩是否共线等因素有关。P和r的测量可揭示荧光体吸收光子和随后发射光子的平均角移。

荧光偏振免疫测定 fluorescence polarization immunoassay; FPTA 荧光素经单一波长的偏振光照射后发出相应的偏振荧光，其偏振程度与荧光分子的大小成正比。在含有待测物质（如药物）的样品中，加入用荧光素标记的该物质及其抗体。当待测物质浓度高时，大部分待测物质经竞争反应都与抗体结合，加入的荧光素标记物质则多呈游离的小分子状态，检测到的荧光偏振程度较低。反之，当待测物质浓度低时，大部分荧光素标记物质与抗体结合形成大分子复合物，检测到的荧光偏振程度高。根据偏振荧光的大小可换算出所测物质的浓度。

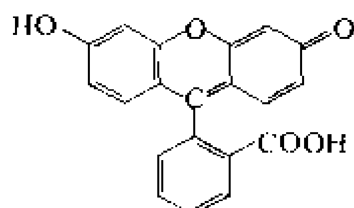
荧光强度 fluorescence intensity 发射荧光的光强度。荧光强度F与荧光物质浓度c、激发光强度I_0的关系为$F=\phi I_0(1-10^{-\varepsilon cl})$。其中$\phi$为荧光量子产率，$\varepsilon$为摩尔吸光系数，$l$为液池厚度。在稀溶液时，上式简化为$F=2.3\varepsilon cl\phi I_0$，此时荧光强度与荧光物质物质的量浓度成正比。实际测定时，如果只取空间分布以及光谱的一部分，则有$F=2.3\varepsilon clk\phi I_0$（$k$为与测定体系有关的常数）。

荧光去偏振 fluorescence depolarization 以直线偏振光或自然光激发含有光学各向异性的荧光分子的体系，该体系所发射的荧光本应是偏振光，观察到的却是去偏振的各向同性荧光的现象称为荧光去偏振。产生荧光去偏振的原因大致有三种：（1）激发跃迁矩与发光跃迁矩的方向不同（如以第二吸收带激发等）；（2）由激发态分子向体系中其他分子发生激发能量转移后再发荧光；（3）受激分子在激发态平均寿命内通过布朗运动转动后发荧光。通过第（2）种方式可以测定分子间的能量转移，第（3）种方式用于分子转动扩散系数的测定。可以用普通光激发后测定偏振度的方式测定荧光去偏振，也可以用脉冲线偏振光激发，测定荧光衰变过程的偏振光特性的变化。

荧光色谱法 fluorescence chromatography 采用荧光检测的色谱方法。如果被测物是荧光物质，则可以直接检测；如果被测物是非荧光物质，则可以在分离前（柱前衍生）或分离后（柱后衍生）使被测物质与荧光试剂反应转变成荧光物质后进行荧光检测。根据所采用的分离方法，可分荧光高效液相色谱法、荧光薄层色谱法、荧光纸色谱法等等。

荧光素 fluorescein 分子式$C_{20}H_{12}O_5$，是一种荧光性染料。不溶于水，可溶于热乙醇、冰醋酸中。荧光素的碱金属盐溶于水，荧光很强。

最大吸收波长为493.5nm，荧光量子产率0.65（pH = 7的水溶液）和0.92（0.1mol · L^{-1}氢氧化钠中）。其异硫氰酸衍生物是蛋白质的荧光标记物，并用于荧光免疫测定中。



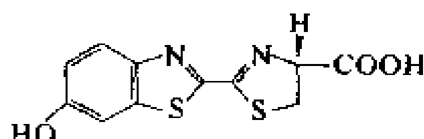
荧光素酶 luciferase 一种能够催化荧光素发生化学反应而产生化学发光的酶。

荧光探针 fluorescence probe 在紫外-可见-近红外区有特征荧光，且其荧光性质（激发和发射波长、强度、寿命、偏振等）可随所处环境的性质，如极性、折射率、黏度等改变而灵敏地改变的一类荧光性分子。最常用于荧光免疫法中标记抗原或抗体，亦可用于表面活性剂胶束、双分子膜、蛋白质活性位点等微环境特性的探测。通常要求探针的摩尔吸光系数大，荧光量子产率高，荧光发射波长处于长波且有较大的斯托克斯位移。用于免疫分析时，与抗原或抗体的结合不应影响它们的活性。

荧光体 phosphor 在外部各种刺激的作用下，可以发射高量子产率荧光或磷光的物质。一般不加区分将两者统称为荧光体。有些荧光体是在纯态下发射特定荧光的物质，如蒽、$CaWO_4$结晶（单晶或粉末）；有些荧光体是在透明溶剂或固体（如玻璃或结晶）中集中存在的发光中心，如荧光素、罗丹明等有机染料，含氧化钨的玻璃，含各种杂质的结晶荧光体等。将有机染料荧光体作为荧光发光基团接上各种反应官能团可以按需要合成荧光探针，用于不发光分子的分析及微环境分析等。

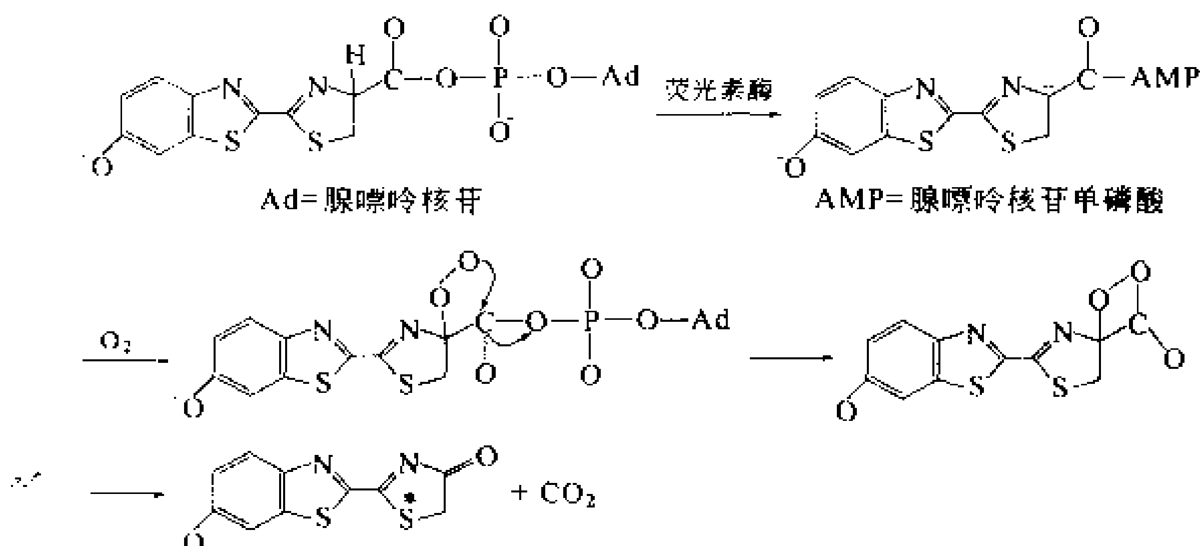
荧光衍生 fluorescence derivatization 对于不发荧光的待测物，通过适当的衍生试剂与之反应，给分子接上荧光基团，从而用荧光进行测定的方法。荧光衍生试剂应同时具有可与目标分子进行反应的官能团和荧光基团，量子产率高，能够从组成复杂的样品中选择性地与待测分子反应。常见的荧光基团有多环芳烃、芳香杂环化合物、香豆素、荧光素等。

萤火虫荧光素 firefly fluorescein 萤火虫荧光素最早是在1957年从生物体中分离出来，人工合成及结构测定的完成是在1963年。荧光素的结构式为



萤火虫荧光素-荧光素酶发光体系是最经典的生物化学发光体系。有关荧光素化学发光的机理，一般认为其中间产物是一个具有二氧杂环丁烷酮结构的化合物。因此，在分子中如果含有一个合适的离去基团，比较有利于进行分子内亲核反应而生成过氧化物。很多实验事实证明，在生成荧光素的腺苷单磷酸盐的过程中需要

ATP，在该反应中磷酸盐是一个理想的离去基团，其反应如下



影像板 image plate；IP 利用潜像存贮技术的二维探测器。当 X 射线照在涂有 Eu^{2+} 感光乳剂的胶片上时，可在胶片上形成能量中心，此后用激光激发这些能量中心，所存贮的能量就会以光子的形式释放出来，记录能量中心的位置和释放光子的数量，即可得到一张 X 射线曝光的电子照片。与传统的 X 射线胶片相比，其优点是灵敏度高，线性范围宽，像素分辨率达到 50μm，可重复使用，无需进行显影、定影等化学处理等。

映谱仪 spectrum projector 又称光谱投影仪。采用这种装置可使谱片上的光谱被放大，并投影到屏幕上，便于在比较大的波长范围和较大的视场范围内观察和评定样品光谱。这类设备有单镜式和双镜式两种。

硬（质）凝胶 *hard gel* 指机械强度高、耐高压的凝胶填料。常见硬凝胶有硅胶和多孔玻璃，适合于在高压下操作的液相色谱分析。

涌浪效应 surge effect 当在气相色谱分析中采用热导检测器时，由于气体样品的进样量过大或液体试样由于瞬间汽化而体积膨胀较大时，往往使稳定的载气气流产生一瞬间的脉动，由于色谱柱的阻力，这种脉动对热导检测器的测定气路影响较小，但对参比气路影响较大，于是在基线上产生一负向的信号，随着气流脉动的消失，基线又逐渐回复平衡，这种现象称为色谱的涌浪效应。

油扩散泵 oil diffusion pump 利用油扩散原理的真空泵系统。可获得 $10^{-3} \sim 10^{-5}$ Pa 的真空度，缺点是易使试样和电子光学系统的内壁受污染。早先油扩散泵是一种最重要的真空泵系统，但随着无污染泵的发展，油扩散泵渐渐退出超高真空系统。但在普通高真空系统中，仍是主要的泵系统。

油磨法 oil-mill technique 将样品粉末分散在由 $C_{20} \sim C_{30}$ 的混合烷烃组

成的石蜡油中，制成糨糊状黏稠液体，置于两片红外窗片中制成半透明薄膜后绘制红外光谱的一种方法。油磨法的优点是快速简单，光谱质量较好。缺点是全波段谱图需用两种分散液体制膜，并测量两次，膜的厚度不易重复难于绘成一完整的谱图。做定量分析时，需使用内标法才能保证较好的准确度。

油脂碘值 fat iodine value 每100g油脂所能吸收碘的克数，用以表示油脂的不饱和程度。根据碘值的大小可划分油脂的干性程度，碘值大于130的油脂，属于干性油；小于100的油脂，属于不干性油；在100～130之间的油脂则为半干性油。在油脂氢化过程中，根据碘值可计算氢化油脂所需的氢量和检查油脂氢化程度。各种油脂的不饱和程度及脂肪酸含量在一定范围内是固定不变的，所以碘值的测定可以帮助了解各种油脂的“组分”是否正常，有无混杂现象等。

油脂挥发物分析 analysis of volatile component in fat 油脂中常含少量的磷脂、固醇和其他杂质等，能吸收水分形成胶体物质悬浮在油脂中。当植物油温度达到100～105℃以上时，油脂中的水先被气化，油脂中的挥发性酸、挥发性油等同时蒸发，根据气化失去质量计算出水分及挥发物的质量。电烘箱105℃恒重法适用于不干性油，电热板法适用于半干性油和干性油挥发物分析，真空烘箱法对不干性油、半干性油和干性油的挥发物分析都适用。

油脂酸败试验 rancidity test of fats 油脂在储藏期间，由于光、热、空气中的氧以及油脂中的水和酶作用，产生醛、酮和有机酸等分解产物，此称油脂酸败。油脂酸败有两种：一是水解酸败，二是氧化酸败，一般油脂主要发生氧化酸败。在氧化酸败过程中，第一个中间产物是过氧化物，过氧化物的多少反映了油脂酸败程度。可用间苯三酚试纸法和间苯三酚乙醚溶液法检验醛的定性反应，确定油脂酸败与否。若试纸变红，表示有醛类存在，试样已发生酸败。

油脂酸价检验 determination of grease acid value 中和1g油脂中的游离脂肪酸所需氢氧化钾的毫克数。利用游离脂肪酸和脂肪均能溶于有机溶剂的特性，以有机溶剂（乙醚或酒精）提取试样中的游离脂肪酸，然后用已知浓度的氢氧化钾溶液滴定游离脂肪酸，根据消耗氢氧化钾溶液的毫升数计算油脂酸价。油脂酸价的大小，是评价油脂品质指标之一。酸价愈小，油脂品质愈好。酸价过高的油脂，常用碱炼的方法加以精制，酸价也是决定油精制时加碱数量的依据。

油脂皂化价检验 determination of fat saponification value 1g油脂完全皂化时所需的氢氧化钾的毫克数。将油脂与过量0.5mol·L^{-1}的氢氧化钾乙醇溶液回流加热，以使其完全皂化。皂化后剩余的碱量，用酚酞作指示剂，用标准盐酸滴定而求得。皂化

价是油脂的理化指标之一，其值具有一定范围，其大小主要取决于该油脂中所含脂肪酸的分子量。平均分子量愈大，则皂化价愈小，反之，平均分子量愈小，则皂化价愈大。

油脂质量鉴定 quality determination of fats 为了鉴定油脂的种类、品质的优劣、酸败的程度、能否食用而进行的检验，常包括下列类型的分析检验：油脂碘值测定（韦氏法）、碘表法、油脂酸价检验、油脂酸败试验（醛定性反应）、挥发物分析、油脂皂化价检验、植物油脂定性试验、β桐油试验、桐油检出试验、蓖麻油检出试验、亚麻油检出试验、矿物油检出试验、大豆油检出试验、花生油检出试验、芝麻油检出试验、棉籽油检出试验、菜籽油检出试验、茶籽油检出试验、大麻籽油检出试验、猪油检出试验等。

铀中钆、钐、铕和镝的测定 determination of Gd, Sm, Eu and Dy in U sample 由于钆、钐、铕和镝的中子吸收截面很高，因此，作为核燃料的铀必须测定有害的痕量钆、钐、铕和镝。测定钆、钐、铕和镝通常均采用光谱法或同位素稀释质谱法，但在测定之前必须将痕量钆、钐、铕和镝与基体元素铀分离。从实际铀样品的分析来看，采用小型阳离子交换柱进行超负载分离既准确、快速，同时操作时不易产生放射性玷污。采用小型阳离子交换分离-光谱法测定铀中钆、钐、铕和镝，检测限为 $n\times10^{-7}\%$。也可以采用膦类萃取剂的萃取法使基体铀与痕量钆、钐、铕、镝分离，再用同位素稀释质谱法测定痕量钆、钐、铕和镝。

游程检验 runs test 在一个有两个元素 a 和 b 的序列中，一个元素 a 或 b 连续出现的区间，称为元素的游程，区间数目即为游程数 r。r 近似遵从平均值为

$$\bar{r}=\frac{2n_1n_2}{n_1+n_2}+1$$

与方差为

$$S_r^2=\frac{2n_1n_2\ (2n_1n_2-n_1-n_2)}{(n_1+n_2)^2\ (n_1+n_2-1)}$$

的正态分布 $N(\bar{r},S_r^2)$。根据正态分布，r 落在 $\bar{r}\pm1.96S_r$ 区间的概率为 0.954，而落在该区间之外的概率 <0.5。若实验的游程数 r 落在该区间之内，则可在 95% 置信水平判定序列中元素的出现是随机的。如有 $n_1=12$ 个 a 与 $n_2=10$ 个 b 组成的序列：$\underline{aa}$，$\underline{bbb}$，$\underline{a}$，$\underline{bb}$，$\underline{aaa}$，$\underline{b}$，$\underline{aaaa}$，$\underline{bb}$，$\underline{a}$，$\underline{bb}$，$\underline{a}$，游程数 $r=11$，计算的 $\bar{r}=11.9$，$S_r=2.27$，置信区间为 [7，16]。实验的游程数 $r=11$ 位于区间内，说明在上述序列中元素 a 与 b 的出现是随机的。

游离酸测定 determination of free acid 通常是指存在可水解金属离子（Fe^{3+}、Al^{3+} 或 Cu^{2+} 等）时游离 H^+ 的测定。游离酸的测定在湿法冶金中尤为重要，因为游离酸浓度的有效控制既可以提高铀等稀有元素的浸出率，又可减少酸耗，从而降低工艺成本。较好的测定游离酸方法是络合剂法，即先在样品中加入已将 pH 值调

到近中性的 EDTA 溶液，使样品中的可水解金属离子与 EDTA 络合，然后用碱滴定样品的溶液中的 H^+。也可采用阳离子交换分离法，即样品溶液通过 Na^+ 型阳离子交换树脂交换柱，使 Fe^{3+}、Al^{3+}、Cu^{2+} 等可水解金属离子被阳离子交换树脂所吸附，然后再用碱滴定流出的 H^+。

有机沉淀剂 organic reagents for precipitation 用于沉淀的有机试剂。相对于无机沉淀剂的优点是：试剂品种多，有的选择性很高，便于选用；生成的沉淀溶解度小，易于沉淀完全；生成的沉淀吸附无机杂质少，且易过滤和洗涤；生成的沉淀摩尔质量较大，有利于提高分析的准确度；生成的沉淀有些组成恒定，烘干后即可称量，简化了操作。有机沉淀剂可分为生成螯合物的沉淀剂和生成离子缔合物的沉淀剂两类。

有机电化学 organic electrochemistry 将电化学的方法用于研究有机化合物，包括有机物的定性鉴定和混合物的定量分析；以及有机反应的物理现象研究，如测定反应速度，结构式的鉴定，顺反异构和互变异构平衡的研究等；进行有机合成；观察反应过程，测量其动力学与机理，确定反应的终产物，研究有机化合物的一些性质，研究反应中间体（自由基）等；并可直接进行生物活体的研究工作。

有机分析 organic analysis 分析化学的一个分支，包括有机化合物的定性、定量、结构及构象等分析。

有机改进剂 organic modifier 为了改善色谱分离和因吸附造成的色谱峰拖尾，在以电解质水溶液为主体的流动相中加入的有机溶剂。

有机共沉淀剂 organic coprecipitant 共沉淀分离中，常用有机共沉淀剂，由于它的选择性较高，且所得沉淀中的有机部分可灼烧除去，从而易实现微量组分与载体的分离。其沉淀机理涉及胶体的絮凝作用、形成离子缔合物或金属螯合物等。如在酸性溶液中，W、Mo、Nb 等的离子以带负电的胶体状态存在，加入单宁、辛可宁等本身易带正电的有机试剂吸附阴离子胶体，絮凝后使共沉淀下来。常用的一些有机共沉淀剂有 8-羟基喹啉、吡啶偶氮类有机试剂、萘、蒽等。

有机磷残留量分析 analyses of organophosphorus residues 对残留在动物、植物以及食品中有机磷农药的定量检测。常测的有机磷农药有甲胺磷、三硫磷、乙硫磷、马拉硫磷、甲基对硫磷、对硫磷、久效磷、敌百虫、乐果、磷胺等。分析步骤一般是采用丙酮、乙腈或乙腈与甲醇的混合溶剂提取残磷。测定方法早期采用酶化学法、单项的比色法和同位素法，目前广泛采用薄层层析法和气相色谱法。气相色谱法中采用火焰光度检测器灵敏度较高，对有机磷具有很好的选择性，能一次性进行多种有机磷农药残留量的测定。

有机磷农药残留 residual and pol-

lution by organophosphorus pesticides 有机磷农药是现有农药中品种最多的一类，约有100多种，多数是杀虫剂（如敌百虫、敌敌畏），少数是杀菌剂（如稻瘟净、异稻瘟净、克瘟散）、除莠剂（如地散磷、草特磷）和杀线虫剂（如除线特、线虫磷、治线磷、除线磷）。有机磷农药施用后，一部分农药直接或间接残存于谷物、蔬菜、果品、畜产品、水产品中以及土壤和水体中。这些农药施用于植物体时，可以被吸附在植株表面，或渗入组织内部；有内吸作用的还会运转到其他部位，施于土壤中的农药，也可以被植物吸收。这些农药经过日晒、风吹、雨淋和植物代谢，以及土壤微生物的作用等，会使其部分或绝大部分发生分解消失，但在一定时间内仍有微量农药残存在环境中或生物体内，造成残留。残存形式有两种，一种是保持原有结构，另一种是其转化或降解产物。农药残留问题是随着农药大量生产和广泛使用而产生的，对人和生物危害很大，各国对农药的施用都进行严格的管理，并对食品中农药残留允许量作了规定。

有机氯残留量分析 analyses of organochlorine residues 有机氯农药具有毒性大、化学稳定性强、不易分解的特点，并会通过土壤、水质、食物在动物、植物及其产品中产生不同程度的残留，测定其中的含量的工作称为有机氯残留量分析。通常检测的有机氯农药有六六六、滴滴涕、六氯苯、多氯联苯。分析步骤一般是：样品制备—试剂提取—净化—仪器检测。有机氯农药极性较弱，脂溶性较高，通常用极性较弱的有机溶剂提取，净化一般采用柱层析法或液液分配法；目前的检测方法有凝胶渗透色谱法、气相色谱法及色谱-质谱联用法，其中以使用电子俘获检测器的气相色谱法灵敏度最高。

有机氯农药残留 residual and pollution by organochlorine pesticides 有机氯农药主要分为以苯和以环戊二烯为原料的两大类。以苯为原料的有机氯农药包括使用最早、应用最广的杀虫剂DDT和六六六，以及六六六的高丙体制品林丹、DDT的类似物甲氧DDT、乙滴涕，也包括从DDT结构衍生而来、生产吨位小、品种繁多的杀螨剂，如三氯杀螨砜、三氯杀螨醇、杀螨酯等。另外还包括一些杀菌剂，如五氯硝基苯、百菌清、稻丰宁等。以环戊二烯为原料的有机氯农药包括作为杀虫剂的氯丹、七氯、艾氏剂、狄氏剂、异狄氏剂、硫丹、碳氯特灵等。此外以松节油为原料的莰烯类杀虫剂、毒杀芬和以萜烯为原料的冰片基氯也属有机氯农药。

有机氯农药施用后，一部分农药可直接或间接残存于谷物、蔬菜、果品、畜产品、水产品中以及土壤和水体中。这些农药施用于植物体上后，可以被吸附在植株表面，或渗入组织内部，有内吸作用的还会运转到其他部位，施于土壤中的农药，也可以被植物吸收。这些农药经过日晒、风吹、雨淋和植物代谢，以及土壤微生

物的作用等，会使其部分或绝大部分发生分解消失，但在一定时间内仍有微量农药残存在环境中或生物体内，造成残留。农药的残毒逐步被人们发现，它们在环境中的迁移与归宿也引起人们的关切。残留在环境中或作物上的有机氯农药可造成农药污染。

有机溶剂效应 organic solvent effect 在火焰原子吸收光谱分析中，有机溶剂引入火焰对原子吸收信号的影响。常用的多数有机溶剂的表面张力和黏度比水小，用有机溶剂代替水溶液，可以获得直径更小的气溶胶，有利于它在火焰中迅速蒸发、解离和原子化。可燃有机溶剂在火焰中燃烧产生热量，提高了火焰温度，分解产生的还原性组分，如 CH、CO、C、C_2 等，改善了原子化环境，有利于自由原子的形成和增强原子吸收信号，提高测定灵敏度。另一方面，有机物分解产生的小分子 OH、CH、CN、C_2、NH、CO 等，在相当宽的波段区有分子吸收带，燃烧不完全产生的碳微粒引起的光散射，又会增强背景吸收，减弱原子吸收信号。

有机试剂 organic reagent 泛指用于化学元素、无机和有机化合物、官能团等的定性或定量测定，以及分析中用于分离、富集和掩蔽等的各种有机化合物。

有机酸的分离与测定 separation and determination of organic acids 将食品组织捣碎以后，依次用热水、硫酸、80%乙醇等加热浸出（如果不能充分浸出时，可进行稀碱处理）。在浸出液中加磷钨酸溶液，以除去蛋白质。将抽出液用硫酸调成酸性后，进行水蒸气蒸馏，将挥发性酸馏出。将残留物用乙醚抽出，得到不挥发酸。对柠檬酸、草酸等要长时间抽提。另外，也可用离子交换树脂分离有机酸，用强碱性树脂 Amberlite IRA-400 吸附有机酸，0.5 $mol \cdot L^{-1}$ Na_2CO_3 洗脱后，使洗脱液通过强酸性树脂 Amberlite IR-120 柱，除去 Na^+。有机酸含量可用气相色谱法（酯法衍生化）、液相色谱法来测定。

有机显色剂 organic chromogenic reagent 光度分析中，常常需要选择适当的试剂与被测离子反应生成有色化合物再进行测定，所用试剂称为显色剂。应用最多的是有机显色剂。有机显色剂及其产物的颜色与其分子结构密切相关，分子中通常都含有生色团和助色团。生色团是某些含不饱和键的基团，如偶氮基、对醌基和羰基等。这些基团中的 π 电子被激发时所需能量较小，波长 200nm 以上的光就能使其激发，故往往可以吸收可见光而显示出颜色。助色团是某些含孤对电子的基团，如氨基、羟基和卤代基等。它们与生色团上的不饱和键相互作用，可影响生色团对光的吸收，使颜色加深。有机显色剂的种类很多，显色剂和显色反应的合理选择是提高光度分析灵敏度和选择性的重要途径。

有机相生物传感器 organic biosensor 与水相相比，有机相生物催化分析的优点是：可以监测许多非水溶

性底物、消除微生物污染、减少副反应、提高热稳定性及生物分子固定化手段简便等。有机相生物传感器将在有机合成、生物工程、环境监测及药物分析等领域有广泛的应用前景。

有机质谱法 organic mass spectrometry; OMS 用质谱仪器对有机化合物进行定性定量分析的方法。主要用于合成物或天然有机化合物的分子量确认、结构解析及其裂解机理的阐明。对于纯的有机化合物，可以直接将样品引入质谱仪器、测定化合物的分子量，并可根据得到的化合物相关碎片信息、推断化合物的可能结构。对于组分复杂的有机化合物，应先分离出纯组分，再进行质谱测定，目前多采用联用仪器进行分析，即把分离的仪器（气相色谱或液相色谱仪）与质谱仪串联使用。对于小分子、热稳定、易挥发的组分，使用气相色谱-质谱联用仪进行分析；对于大分子、热不稳定、不易气化的极性化合物，则可以使用液相色谱-质谱联用仪进行分析。

有偏估计 biased estimation 用样本值求得的估计值来估计待估参数的真值有系统误差。样本方差 S^2 是总体方差 σ^2 的无偏估计值，不同的样本方差 S^2 在 σ^2 附近摆动，其期望值是 σ^2。而极差 R 不是总体标准差 σ 的无偏估计值，而是它的有偏估计值，极差 R 期望值不是总体标准差 σ，两者之间有系统误差。但经过 $R=d_n S$ 校正之后，可用 R 来估计标准（偏）差，其中 d_n 是与测定次数有关的系数，可由有关的统计表中查得。

有效半衰期 effective half-life 进入体内的放射性核素的活度通过放射性衰变和体内排出减少一半所需的时间，以 T_e 表示。

$$T_e=\frac{T_b T_{\frac{1}{2}}}{T_b+T_{\frac{1}{2}}}$$

式中，T_b 和 $T_{\frac{1}{2}}$ 分别是生物半排期和物理半衰期。T_b 随体内各组织、器官对放射性核素的代谢速率不同而不同。

有效场 effective field 见**虚构场**条。

有效成分 active ingredient 农药产品中具有生物活性的特定化学成分。有效成分含量是农药产品标准中重要的质量指标，常以质量百分数表示，其含量测定方法亦是农药标准中的主要部分。生物活性是指对昆虫、螨、病菌、鼠、杂草等有害生物的行为、生长、发育和生理生化机制的干扰、破坏、杀伤作用，还包括对动、植物生长发育的调节作用。

有效峰数 effective peak number; *EPN* 两个相邻碳数同系物之间能容纳的分离度 $R=1$ 的色谱峰峰数（有时用 Z 表示），其表达式为

$$EPN=2\,\frac{(t_{R_2}-t_{R_1})}{W_{\frac{1}{2}(1)}+W_{\frac{1}{2}(2)}}-1$$

式中，t_{R_2}，t_{R_1} 分别为相邻两峰 1 和 2 的保留时间；$W_{\frac{1}{2}(1)}$，$W_{\frac{1}{2}(2)}$ 分别为相邻两峰 1 和 2 的半峰宽。

有效理论塔板数 number of effec-

tive theoretical plates　由于在色谱柱中存在着死体积（在组分的保留时间中包括了死时间），因此，从分配平衡理论计算出来的理论塔板数 n 并不能完全反映柱效，利用扣除死体积（或扣除死时间）后的调整保留体积（时间）计算的有效理论塔板数能更真实地反映柱效。有效塔板数用 $n_{有效}$ 表示

$$n_{有效}=16\left(\frac{t'_R}{W}\right)^2$$

或

$$n_{有效}=554\left(\frac{t'_R}{W_{\frac{1}{2}}}\right)^2$$

式中，t'_R 是该组分的调整保留时间；W 是基线宽度；$W_{\frac{1}{2}}$ 是半峰宽。参见**理论塔板数**条。

有效数字　significant figure　对于所记录的没有小数位且以若干个零结尾的数值，从非零数字最左一位向右数得到的位数减去无效零（仅为定位用的零）的个数，对于其他的十进位数从非零数字最左一位向右数得到的位数，就是有效数字。如 1.2，0.12，0.012，0.0012 等，它们的有效数字都是两位。在实验中，记录分析测试数据时，记录的数据与表示结果的数值所具有的精确度应与所使用的测量仪器和工具的精确度相一致。所记录的数除最后一位数字具有不确定性外，其余各位数字都应是准确的。对测试数据进行取舍时，应遵守有效数字的修约规则。

有效塔板高度　effective plate height　在扣除死体积（死时间）后色谱柱中每一块有效理论塔板的高度，以 $h_{有效}$ 表示，单位是 mm。有效理论塔板高度与有效理论塔板数一样可用来表征色谱柱的效能，$h_{有效}$ 越小，柱效越高。$h_{有效}=\frac{L}{n_{有效}}$，式中，L 为色谱柱长度；$n_{有效}$ 为有效理论塔板数。

有效淌度　effective mobility　绝对淌度是无限稀释时单位电场强度下离子的平均迁移速度。实际上不可能在无限稀释而又无其他离子影响下进行工作，所以需要引入有效淌度（μ_{ef}）的概念。有效淌度是所有产物的离解度（α_i）和分子的第 i 离子形式的绝对淌度（μ_i）乘积之总和。

有效中量　median effective dose　衡量药剂对靶标生物体如真菌、细菌或植物体毒力大小的一个量，是能使生物群体半数产生某种药效反应所需的药剂用量。简写为 ED_{50}。

有效中浓度　median effective concentration　衡量药剂对靶标生物体如真菌、细菌或植物体毒力大小的一个量，能使生物群体半数产生某种药效反应所需的药剂浓度。简写为 EC_{50}。

有证标准物质　certified reference material; CRM　用建立了计量溯源性的方法确定其一种或几种特性量值及其一定置信水平的不确定度，并附有定值部门所发布的证书或其他文件的标准物质。参见**标准物质**条。

诱导反应　inductive reaction　见**诱导效应**条。

诱导力　inducing interaction force　分子间相互作用力的一种形式。非极

性分子没有固有偶极矩，但当其受到电场作用时，分子中电荷常常发生分离。被诱导产生偶极。分子的诱导偶极矩 μ 与外加电场强度 E 成正比，$\mu=\alpha E$，α 为被诱导分子的极化率。一个非极性分子 i 处在邻近的极性分子 j 的电场中时，平均诱导能 U_{ij} 为

$$U_{ij}=-\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2r^6}\left(\alpha\mu_j^2+\alpha\mu_i^2\right)$$

式中，ε_0 为介电常数；r 为两个分子中心之间的距离；α_i、α_j 分别为分子 i、j 的极化率；μ_i、μ_j 分别为分子 i、j 的偶极矩。

诱导匹配 induced-fit 为了解释酶与特定基质发生特异作用而提出的一种假说。当基质与酶结合时，酶分子为了使其催化作用更有效而本身发生构象变化，这种现象被称为诱导匹配。为了解释酶对基质的结合特异性，很早就有钥匙与锁关系的学说。D. E. Koshland 则于 1968 年提出了诱导匹配的假说，因此又称 Koshland-Némthy-Filmer 模型。X 射线衍射等已经证实，羧肽酶与基质结合时确实发生了结构变化。他们还认为酶对基质同系物活性低的原因并非是对基质同系物结合的亲和性低，而是结合时最大速度 V_{max} 降低之故。诱导匹配说揭示，与酶结合的基质信息发生变化时酶其他部位的构象也随之变化。在分子识别研究中，Hamilton 等设计了被称为分子关节的主体分子，该分子与 1-丁基胸腺嘧啶结合时伴随结构变化（像关节一样能够转动），即通过“诱导匹配”结合客体。

诱导效应 inductive effect 用于分析的反应中，有的氧化还原反应进行速度极慢，但当有另一反应进行时，会促使这一慢反应加快进行，此现象称为诱导效应。例如，MnO_4^- 与 Cl^- 间的反应极慢，但若用 MnO_4^- 滴定 HCl 溶液中的 Fe^{2+}，由于 MnO_4^- 与 Fe^{2+} 间的反应则会诱导加速 MnO_4^- 与 Cl^- 间的反应，使滴定结果偏高。此时 MnO_4^- 与 Fe^{2+} 间的反应称为诱导反应；MnO_4^- 与 Cl^- 间的反应称为受诱反应。在涉及物质结构的研究中，将电场等作用下因电子与核间距离的改变，以及原子核间距离的相对位移导致分子偶极矩改变的现象亦称之为诱导效应。

诱发的生物发光 induced bioluminescence 由理化因子诱发生物发光的现象。因为自发的超微弱发光过于微弱，人们采用多种现代化技术诱发发光强度，其中物理法有：X 射线和 γ 射线、快电子、紫外线、超声波、微弱的直流电和交流电、加热、超氧压等。在这些因素的作用下，生物的一些分子，包括水分子吸收能量离解产生自由基，或使分子处于激发态，在能量转移和耗散的过程中部分能量以光子的形式释放出来。化学法则常常加入 H_2O_2 或有机过氧化物等诱发产生单线态氧，以增强脂类过氧化，从而使发光增强。Fe^{2+}（$FeSO_4$）可催化线粒体膜上脂类的氧化，催化一系列自由基反应，而自由基复合时会发光。此外鲁米诺、Eu^{2+}-四环素、NaOH 等都可以增强生物发光。人们用诱发

发光法还测到亚细胞器、线粒体、微粒体及人工类囊体(脂质体)的发光。

釉化处理　glazing　对载体进行钝化处理的一种方法，通过釉化处理，载体表面形成一层玻璃化的釉质，称为"釉化载体"，这种载体的吸附性能小，强度大，可分析强极性物质。具体做法是将载体在 2.3% 的 Na_2CO_3-K_2CO_3(质量比为 1∶1)或硼砂水溶液中浸泡两昼夜，干燥后先在 870℃ 下煅烧 3.5h，然后升温到 980℃ 煅烧 40min，玻璃化的釉质即可形成。

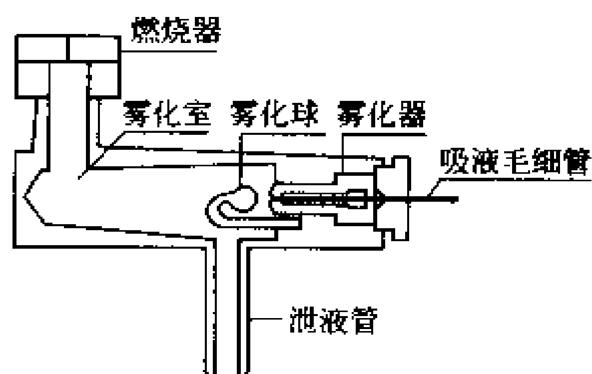
淤浆填充法　slurry packing method　又称湿法柱填充。参见**湿法柱填充**条。

玉米赫霉烯酮　zearalenone　真菌禾谷镰刀菌产生的一种雌激素真菌毒素，化学名为 6-(10-羟基-6-氧基-1-碳烯基)β-雷琐酸-μ-内酯。它主要存在于玉米和玉米制品中，小麦、大麦、高粱、大米中也有一定程度的分布。它虽然毒性较低，但对家禽特别是对猪和羊的影响较大。饲料中 $1\mu g \cdot g^{-1}$ 的玉米赫霉烯酮就会使动物产生雌性化，更高的浓度($50 \sim 100\mu g \cdot g^{-1}$)将会对怀孕、排卵、移植、胎儿的发育、新生动物的生存力产生不利的影响。玉米赫霉烯酮的检测方法包括：核磁共振、紫外、质谱、荧光、毛细管电泳、薄层色谱法、HPLC、酶联吸附免疫法、免疫亲和柱-荧光法、免疫亲和柱-HPLC 法等。

预报值　prediction value　根据所建立的回归方程或回归曲线，由自变量值预估的因变量值。

预共振拉曼光谱　preresonance Raman spectroscopy　当激发线的频率(能量)和化合物的电子跃迁频率接近但还没有超过分子的跃迁频率(能量)时发生在某些拉曼谱带增强的效应。共振拉曼散射与预共振拉曼散射的区别仅仅在于激发线的频率和电子吸收跃迁频率是否完全一致。

预混合型火焰原子化器　premix flame atomizer　又称预混合型燃烧器。一种广泛使用的火焰原子化器。由雾化器、预混合室和缝型燃烧器及相应的气路组成，如下图所示。雾化器将试样雾化成直径为微米级的气溶胶。预混合室使粒度大的气溶胶凝聚为更大的液珠沿室壁流入泄液管排走，使进入火焰的气溶胶的粒度更均匀，同时使燃气、助燃气和气溶胶在室内充分混匀，以减少其进入火焰时引起扰动。缝型燃烧器产生层型火焰，使进入火焰的气溶胶脱溶、蒸发和原子化。此种原子化器的优点是重现性好；提供了稳定和可重复性燃烧条件，噪声低；吸收光程长，有足够的灵敏度；干扰低和安全性好。缺点是消耗的试样量多；样品利用效率低，约为 10% ~ 15%；气溶胶直径分布范围宽，



从 < 5μm 到 25μm 或更大。

预混合型燃烧器 premix burner 在原子吸收光谱分析中又称为预混合型火焰原子化器，一种广泛使用的火焰原子化器。参见**预混合型火焰原子化器**条。

预燃效应 prearcing or presparking reaction 当蒸发大量试样时，仅在试样蒸发初期谱线强度有变化，以后谱线强度基本不变，这种现象称为预燃效应。

预热区 preheating zone 靠近燃烧缝口的火焰区域。由于分析物在火焰中整个平均停留时间是毫秒级，试样气溶胶由雾化器快速通过火焰温度较低的焰心区，只受到火焰的初步加热（预热），主要作用是脱去溶剂转化为干气溶胶，并部分蒸发。当干气溶胶随着火焰气流运动进入温度较高的内焰区，进一步受到火焰的加热，才能开始解离和原子化。

预柱 pre-column 在色谱分析中，当样品组成比较复杂或是对分离有某种特定的要求时，常常在分析用色谱柱之前串联一根小柱，此柱称为预柱。预柱中的填料可以与分析柱相同，也可以不同，视分析样品和任务而定，它的作用是进行预分离，使特定的组分进入分析柱，而其他组分留在预柱中，这样有利于对特定组分的分离。有时预柱也可以是化学反应柱，用以吸收或转化某些组分。

元素灵敏度因子 elemental sensitivity factor 对典型均匀环境中的原子，其谱峰相对于其标准原子峰（如F1s）的峰强。设样品均匀，则以峰高或峰面积表示的强度除以相应的灵敏度因子，给出被测原子的相对数目。元素灵敏度因子不仅与元素种类、激发谱线、激发源能量有关，还与元素所处的状态有关，在定量分析中有着重要的作用。

原电池 primary cell 能自发地将化学能转变成电能的装置。

原级 X 射线荧光 primary X-ray fluorescence 以能量足够高的电子（或其他荷电粒子）束轰击样品而激发出的 X 射线荧光称为原级 X 射线荧光。记录和分析原级 X 射线荧光光谱，以测定样品化学成分的分析方法，称为原级 X 射线荧光光谱法。

原级 X 射线荧光光谱法 primary X-ray fluorescence spectrometry 以能量足够高的电子束直接轰击样品，记录和分析所产生的原级 X 射线荧光光谱，以测定样品化学成分的分析方法。原级 X 射线分析法所用的仪器设备，可以分为两大类：一类是应用普通的可拆卸式 X 射线管的经典仪器；一类是电子探针 X 射线显微分析仪，或配有 X 射线分析仪的扫描电子显微镜。与 X 射线相比，电子束易于聚焦，而穿透能力较弱，所以，原级 X 射线荧光分析法更适合于薄膜、表面和微区的成分分析；另外，对于轻元素其激发效率较高。

原假设 null hypothesis 又称零假设，记为 H_0。对样本进行统计检验时，事先做出两种统计假设，一种是假

设各样本来自同一总体，记为 H_0；另一种是假设为各样本非来自同一总体，记为 H_1。因为在统计检验时总是先假设各样本是来自同一总体，因此，将 H_0 称为原假设。当根据样本值进行检验的结果，在一定置信度下与原假设有显著性矛盾时，则拒绝原假设 H_0，代之以接受另一假设 H_1，故将 H_1 称为备择假设。

原始数据 original value 在试验和调查中直接得到的、没有进行过任何处理的数据。它蕴含了客观事物中的原始信息，经过科学的加工处理，将其转化为人们所需要的信息和知识。

原位分析 in situ analysis 原位分析(in situ)是为了描述作为对象的生物体的某一功能或某一反应在生物体原位置被发现的状态而使用的形容词。试管分析(in vivo)包括原位分析(in situ)，但后者代表更为限定的状态。不仅限于生物体内，在原位置继续进行的化学反应也使用这一用语。在分析化学中，原位分析指对生物体、非生物体如湖水、固体表面的化学反应进行原位置分析。

原位富集进样 in situ concentration sampling 将原位富集与进样相结合。流动注射是一种高效微量进样技术，与各种富集方法联用，发展成为一种高效原位富集动态进样技术，已开发出多种流动注射在线柱交换吸附、萃取、共沉淀等预富集进样方法。它的特点是样品和试剂用量小，富集效率高，灵敏度高，检出限低，分析速度快。它的引入使原子吸收光谱分析的进样技术进入了一个更高的发展阶段。

原位杂交 in situ hybridization 用标记的分子探针与细胞涂片或组织切片上的细胞染色体 DNA 或 RNA 进行杂交以检测靶序列或靶分子存在的量和位置的一种分子杂交方法。该法将分子检测与形态学观察结合起来，为其独有的特点，是研究分子病理学的有用工具和手段。

原油分析 crude assay 包括原油的实沸点蒸馏和其他理化性质项目的分析。通过分析获得反映其化学性质的原油的元素组成、含硫化合物、含氮化合物、含氧化合物和沥青状物质等数据以及测试反映其物理性质的原油的沸程与馏分组成、平均沸点、密度、黏度、闪点、燃点、低温性质等及水分、含盐量、残炭等指标，以进行原油评价和指导石油炼制过程设计和控制。

原油评价 crude evaluation 是旨在确定原油的类别、特点及其经济价值，为加工方案提供数据，预见其产品性质的各种实验室分析和试验的统称。通常包括原油一般性质分析、实沸点蒸馏、窄馏分性质测定、直馏产品性质测定和馏分族组成测定等。

原子发射 atomic emission 被热能、电能或其他能量激发的原子从激发态跃迁至较低激发态或基态时，以光子的形式释放出能量，辐射出特征波长的谱线，这一过程称为原子发射。

原子发射光谱 atomic emission spectra 被热能、电能或其他能量激发的原子从激发态跃迁至较低激发态或基态时，以光子的形式释放出能量，

辐射出特征波长的谱线。把原子所辐射的特征谱线按波长或频率的次序进行排列形成的光谱称为原子发射光谱。

原子光谱 atomic spectrum 原子外层电子在不同能级之间跃迁产生的光谱。在通常的情况下，原子处于能量最低的基态。基态原子的外层电子选择性吸收特征频率的辐射，由基态跃迁到激发态，产生原子吸收光谱。基态原子受到热能、电能、非弹性碰撞等作用，吸收能量而跃迁到激发态，激发态原子又以自发发射的形式去活化，回到能量较低的能级态或基态，产生原子发射光谱。如果原子的外层电子吸收特征频率辐射由基态跃迁到激发态，接着又以辐射形式去活化由激发态回到基态或较低能级态，则产生原子荧光。因此，原子光谱包括原子吸收光谱、原子发射光谱和原子荧光光谱。

原子光谱分析法 atomic spectroscopy; atomic spectroanalysis; AS 简称原子光谱法。是根据原子光谱的波长和强度进行元素定性和定量分析的一种仪器分析方法。包括原子发射光谱法(AES)、原子吸收光谱法(AAS)和原子荧光光谱法(AFS)。它的特点是灵敏度高，检出限低，精密度好，选择性好，动态范围宽(AES, AFS)，能同时进行多元素测定。广泛用于各种样品中元素的定性定量分析。

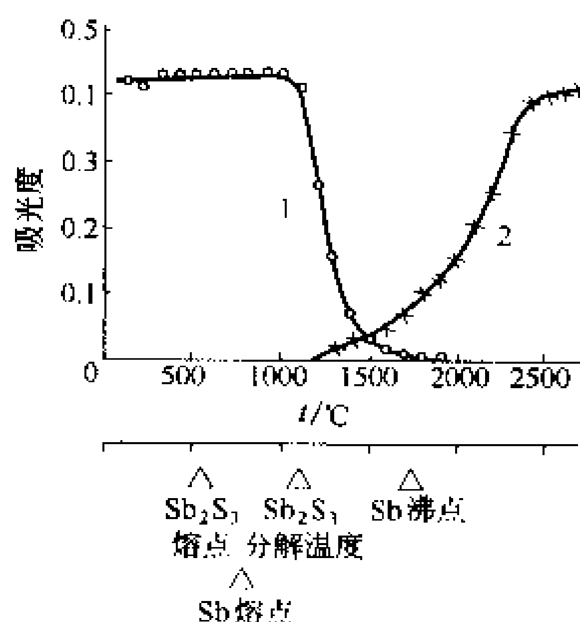
原子化 atomization 将试样中被测元素或其化合物转化为自由原子的过程。原子化是整个原子吸收光谱分析中最关键的环节。常用的原子化方法有：(1)火焰原子化法，以化学火焰为热源实现原子化，应用最广的火焰是空气-乙炔火焰和氧化亚氮-乙炔火焰；(2)电热原子化法，以低电压大电流供电的管式石墨炉作为热源使试样分解和被测元素原子化；(3)低温原子化法，利用某些元素(Hg)本身或其氢化物在低温下的易挥发性，将其导入原子化器内在较低的温度下产生原子蒸汽的方法，包括氢化物发生法和低温汞原子化法；(4)非热原子化法，不使用热源的原子化方法，研究最多并已商品化的是通过辉光放电产生阴极溅射实现原子化。上述原子化方法各有特点。

原子化池 atomization cell 产生和储存自由原子的装置。不管是火焰原子化器、石墨炉、石英管原子化器、还是阴极溅射原子化器，都既产生又储存自由原子。原子化池这一术语现已不常用，现在通用的术语是原子化器。

原子化阶段 atomization stage 石墨炉原子化升温程序中将被测元素转化为自由原子阶段。它是整个原子吸收光谱分析升温程序：干燥、灰化、原子化和净化等操作中最关键的环节，直接影响原子化效率和测得的灵敏度。原子化阶段需优选原子化温度和时间，最佳的原子化温度和时间都是由实验得到的吸光度随温度或时间的变化曲线来确定。

原子化曲线 atomization curve 在石墨炉原子吸收光谱分析时，被测元

素的吸光度随原子化温度的变化曲线。由原子化曲线不仅可以确定最佳的原子化温度，而且，结合物理化学常数可以研究原子化机理。下图是硫酸锑的灰化和原子化曲线，锑开始损失和开始原子化的温度与 Sb_2S_3 的分解温度一致，说明硫酸锑的原子化过程中先还原生成 Sb_2S_3，再由 Sb_2S_3 分解产生锑原子。



1—灰化曲线；2—原子化曲线

原子化时间 atomization time 在石墨炉升温程序的原子化阶段，使试样中被测元素完全转化为自由原子所需的时间。原子化时间的长短取决于试样的性质、试样量和原子化温度，最佳的原子化时间由实验得到的吸光度随时间的变化曲线来确定。

原子化温度 atomization temperature 在石墨炉升温程序的原子化阶段，使试样中被测元素转化为自由原子的温度。原子化温度取决于被测元素的性质。最佳的原子化温度由实验得到的原子化曲线确定，选取原子化温度的原则是，在保证获得最大原子吸收信号或能满足测定要求的前提下，使用低的原子化温度。过高的原子化温度会缩短石墨炉原子化器的使用寿命。

原子化效率 efficiency of atomization 自由原子数与包括原子、离子、激发态原子、处于结合状态的原子等各种形态的总原子数之比。原子化效率是决定测定灵敏度和准确度的主要因素，取决于被测元素性质及其所处的结合状态，也受到共存组分、雾化效率、原子化条件等多种因素的影响。不同作者得到的原子化效率的数据差别很大，要利用文献数据进行定量比较是十分困难的，但用来估计不同元素原子化的相对难易程度还是有参考价值的。对火焰原子化来说，原子化效率还随火焰高度而改变，因此，原子化效率只有针对特定的火焰区而言才有意义。对于电热原子化，直接进样于石墨炉内，样品利用效率高，自由原子在炉内平均停留时间比火焰内长约1000倍，因此，电热原子化法的灵敏度比火焰高约3个数量级。

原子力显微镜 atomic force microscope；AFM 利用原子力获得显微图的装置就称为原子力显微镜。当针尖与样品表面的间距为零点几个纳米时，样品表面和针尖之间就存在可测量的原子作用力，利用对每个点的原子力的测量可以得到原子力的分布图，在斥力和接触模式中，原子力大小和针尖与样品间的间距成函数关系，

因此可以获得形貌像。在引力和非接触模式中,范德华力、交换力、静电力或磁力被检测,并不能提供原子分辨率,但可以获得有关表面的重要信息如磁力显微,电力显微等。

原子敏化荧光 sensitized fluorescence of atom 激发态原子通过碰撞将自身的激发能转移给另一个原子,使另一个原子激发,后者再以辐射去活化方式而发射的荧光。

原子能级图 energy level diagram of atom 原子体系内可能存在的能级的表示图。原子在不同的状态下所具有的能量,称为原子能级。根据量子理论,原子只能处于一系列的定态中,一定的原子状态与一定的能级相联系,原子能级常用能级图表示。在能级图中,纵坐标表示能量标度,左边用电子伏特[注:1eV = (1.602189 ± 0.0000046) × 10^{-19}J]标度,右边用波数标度。$n=1$ 的状态是基态,能量最低,$E=0$;$n=\infty$ 相当于电子完全脱离原子核的束缚而电离,相应的能级为电离能。每一光谱系的极限频率 ν_∞ 相当于 $n=\infty$ 的电离状态,波数 $\sigma=0$。原子体系内,所有可能存在的能级,按其高低用一系列的水平线表示,水平线之间的距离表示能级差。各能级之间的垂直距离表示跃迁时以电磁辐射形式释放能量的大小。

原子气体激光器 atomic gas laser 气体激光器中的一类。它包括各种惰性气体激光器和各种金属蒸气激光器。其中氦氖激光器是最常用的一种,也是研究最为成熟的激光器。它的输出激光波长为632.8nm,但这类激光器的输出功率较小,仅几毫瓦到100mW。

原子散射因子 atomic scattering factor 原子散射X射线的能力。其定义为:在X射线的照射下,一个原子在衍射方向上散射波的振幅与一个自由电子在该方向上散射波的振幅之比。其值的大小与核外电子的空间分布有关,即与原子的形状有关,所以原子散射因子也叫形状因子。除此以外,原子散射因子的大小还和散射方向有关,当散射方向与入射方向一致(散射角为零)时,原子散射因子就等于其原子序数,即核外电子数,随着散射角的增大,散射因子随之减小。原子散射因子有几种表示法:一种是画出 f-$\sin\theta/\lambda$ 曲线;一种是列表表示(《International Tables for X-ray Crystallography》Vol. Ⅲ中列出了各种原子在不同 $\sin\theta/\lambda$ 时的原子散射因子值);第三种是给出 f 与 $\sin\theta/\lambda$ 的近似函数关系式,便于在计算机中进行运算。

原子探针场离子显微镜 atomic probe field ion microscopy; APFIM 一种可以判断被观察原子质谱性质的场离子显微镜。其原理是在场离子显微镜微通道板和荧光屏的中心各打一圆孔,在场离子显微镜正常工作,荧光屏上看见场离子图像后,转动尖端的方位,使待研究的原子离子像对准中心孔,然后叠加一脉冲负压于尖端,使待研究的原子解吸或蒸发,它以离子状态通过探孔,被后面的质谱计检测其荷质比。原子探针场离子显微镜可以

确定感兴趣的吸附粒子、杂质和填隙物的质谱性质。在冶金学中用于确定样品的不同原子结构和组成，还可以确定合金的局部浓度变化等等，是真正的从一个原子的角度来研究表面的一种仪器。它还可以通过场蒸发一层层剥离，得到三维结构组成的信息。

原子吸收 atomic absorption 原子吸收辐射能量由基态或较低能态跃迁到较高能态同时伴随原子吸收光谱产生的过程。1802 年，W. H. Wollaston 在研究太阳光谱时发现了钠原子吸收现象，1817 年 J. Fraunhofer 在研究太阳光谱再次观察到了钠原子吸收现象，并测定了未分辨的 D 线（钠双线）的平均波长为 0.0005887mm。1820 年 D. 布鲁斯特首先对夫劳霍弗线产生的原因做出了基本上正确的解释，认为是由于太阳外围大气圈对太阳光吸收的结果，1855 年 R. Bunson 和 G. R. Kirchhoff 用焰色反应证实火焰的颜色是某一元素的特征，指出太阳连续光谱中的暗线是发射线通过太阳冷的外围大气圈时钠原子吸收辐射的结果，并将这一正确的认识应用于实践，发现了新元素 Cs 和 Rb。1905 年，R. W. Wood 通过气体中的共振吸收权威性实验阐明了原子吸收光谱，用汞放电灯辐照加热汞产生的汞蒸气，在屏幕上出现由于汞光束中断所形成的阴影。1939 年 T. T. Woodson 第一次将此方法应用于定量分析，测定了元素汞含量。1955 年澳大利亚科学家瓦尔西（A. Walsh）、荷兰学者 C. T. J. Akemade 和 J. M. W. Milatz 分别独立地发表了原子吸收光谱分析方法的论文，开创了火焰原子吸收光谱法。1959 年前苏联学者里沃夫（B. V. L'vov）开创了石墨炉电热原子吸收光谱法化法。为表彰原子吸收光谱分析的奠基人瓦尔西和石墨炉原子吸收光谱分析的开创者里沃夫对发展原子吸收光谱所做出的杰出贡献，在 1991 年和 1997 年挪威卑尔根和澳大利亚墨尔本召开的第 27 届和第 30 届国际光谱学大会（CSI）上分别授予他们第一届和第二届 CSI 奖。原子吸收光谱法是测定痕量和超痕量元素的有效方法，获得了广泛的应用。尤其是石墨炉原子吸收光谱法，与质谱法和中子活化法一起被公认为测定超痕量元素的三种主要方法之一。

原子吸收分光光度法 atomic absorption spectrophotometry 又称原子吸收光谱法。基于被测元素的基态原子对特征辐射的吸收程度进行定量分析的一种现代仪器分析方法。1955 年瓦尔西（A. Walsh）提出了原子吸收光谱法，从理论上证明峰值吸收系数与原子浓度之间存在线性关系，可用峰值吸收系数代替积分吸收系数进行原子吸收光谱分析，并提出用锐线光源空心阴极灯来测量峰值吸收系数，对原子吸收光谱法的理论、仪器和应用方面都做出了重大的贡献，被公认为原子吸收光谱法的奠基人。为表彰瓦尔西对发展原子吸收光谱所做出的杰出贡献，1991 年在挪威卑尔根召开的第 27 届国际光谱学大会（CSI）上授予他第一届 CSI 奖。原子吸收光谱法，按使用的原子化方法不同，分为火焰原

子吸收光谱法(FAAS)、石墨炉原子吸收光谱法(GFAAS)与低温原子吸收光谱法。原子吸收光谱法的优点:(1)检出限低,FAAS 可达 $10^{-6} \sim 10^{-9}$ g/ml,GFAAS 可达 $10^{-10} \sim 10^{-14}$ g;(2)选择性好,原子吸收信号检测是专一性的;(3)精密度高,FAAS 最好可达到千分之几,GFAAS 一般约为3% ~5%;(4)分析速度快;(5)用样量少;(6)应用范围广,直接原子吸收光谱法可以测定周期表中的大多数金属和准金属元素,间接原子吸收法可以测定非金属、高温难熔元素和有机化合物,以及分析元素的同位素。缺点是校正曲线的线性范围窄,目前尚难于对多元素进行同时测定。

原子吸收分光光度计 atomic absorption spectrophotometer 又称原子吸收光谱仪。一种用于原子吸收光谱分析的仪器。它是一种信息转换装置与通讯装置,将储存于被分析物内的有关其物理和化学特征的信息转换为可为研究者处理和阐释的信息。它分为双光束和单光束仪器,前者光路结构简单紧凑、无需分束,光能量损失小,有利于减少光电倍增管的散粒噪声和提高仪器的信噪比,但存在光能量波动引起的仪器基线漂移。后者消除了光源波动的影响,提高了仪器的稳定性,但光能量损失严重。目前市场上销售的商品仪器主要是单光束仪器。20 世纪 50 年代末 ~60 年代初,英国 Hilger-Watt 公司与美国 Perkin-Elmer 公司分别推出了世界上最早的火焰原子吸收光谱分析测量装置与专用商品仪器,1970 年 Perkin-Elmer 公司生产了世界上首台 HGA-70 型石墨炉原子吸收光谱仪器。我国第一台单光束火焰原子吸收分光光度计商品仪器于1970 年在北京科学仪器厂面世。它由光源、原子化器、分光系统、辐射检测器、信号处理、读出装置等 5 个基本部分与必要的附属装置组成。仪器所用的光源分为两类,一类是锐线光源,主要是空心阴极灯和无极放电灯,为仪器光学系统提供一个输出稳定、发射强度大的特定波长的锐线光谱,用于产生原子吸收分析信号;另一类是连续光源,主要是氘灯,用于校正背景。原子化器将试样中被测元素转化为自由原子,有火焰原子化器(常用的是预混合型原子化器)和电热石墨炉原子化器(常用的是马斯曼型高温炉)。分光系统由入射狭缝、准直镜、色散元件(光栅)、物镜和出射狭缝组成,主要作用是将光源辐射引入原子化器和将分析线引入检测器,有三种型式:Littrow 型、Ebert 型和 Czerny-Turner 型。检测器是一种转换器,最常用的是光电倍增管,现代仪器已采用多通道光子转换器如光二极管阵列(PDA)和电荷偶合检测器(CCD),将微弱光信号转换为电信号。信号的处理包括信号转换(DC 和 AC 信号的相互转换,相位改变,电流信号转为电压信号、模拟信号转为数字信号),信号放大,数学计算(积分、微分、对数转换),信噪比增强(数据平滑、滤波)和信号显示等。在原子吸收光谱仪器中,通常使用光源调制技术,将光源调制成方波脉冲信

号，以与来自样品和火焰的任何直流发射信号分开，同时采用高的调制频率f(400～500Hz)，降低随$\frac{1}{f}$而变化的噪声，使用窄通带的带通滤波器和锁相放大器以降低白噪声。原子吸收信号读出装置是一种转换器，将电信号转为能被人们理解的信息。常用读出装置是CRT和记录仪，显示和打印吸收峰形、吸光度值和浓度直读。主要的附属装置是背景校正器，商品仪器上常用的背景校正器有氘灯、塞曼效应和自吸收校正背景装置。

原子吸收光谱　atomic absorption spectrum　处于基态和低激发态的原子吸收辐射后，将跃迁到高激发态，形成按波长排列的暗线或暗带组成的光谱。每一种元素有其自身的特征光谱。早在1802年，伍朗斯顿(W. H. Wollaston)发现了太阳光谱中的黑线，1917年夫劳霍弗(J. Fraunhofer)在黑屋内将一块火石玻璃棱镜放置在经纬仪前，让太阳光通过小缝投射到棱镜上，用经纬仪上的望远镜观察光谱时看到了很多条黑度不等的黑线密集在光谱上，再次观察到了太阳光谱中的黑线，并用字母D予以标记。当用光照明狭缝时，未能观察到这些黑线，只看到一些位置与太阳光谱中D黑线相同的亮线。他测定未分辨的D线的平均波长为0.0005887mm，与现在的精确值0.0005892mm非常相近。

原子吸收光谱仪　atomic absorption spectrometer　又称原子吸收分光光度计。进行原子吸收光谱分析的仪器，参见**原子吸收分光光度计**条。

原子吸收联用技术　combined technique of atomic absorption　以适当的接口为界面，将原子吸收光谱与其他分析技术（主要是色谱技术、流动注射技术、氢化物发生技术）联合并融合了各自优点的综合分析技术。原子吸收光谱与色谱联用，综合了色谱高分离效率和原子吸收光谱检测的高灵敏度、特效性的优点。已出现了气相色谱、液相色谱、离子色谱与火焰原子吸收光谱或石墨炉原子吸收光谱各种联用装置，成为环境和生物样品中铅、砷、硒、锡等痕量元素的化学形态分析的有效手段。原子吸收光谱与流动注射联用，实现在线、连续进样，节省了试样，提高了雾化效率和分析速度，并很好地克服了高含盐量和高黏度试液进样的困难，通过在线富集，大大地提高了测定灵敏度和降低了检出限。原子吸收光谱与氢化物发生法联用，提高了进样效率，通过氢化物发生使被测定元素与基体分离并得到富集，从而能获得高的灵敏度和低的检出限。联用技术是原子吸收光谱分析今后一个重要的发展方向。

原子吸收线轮廓　atomic absorption line profile　原子所吸收的光谱线强度I随频率ν或波长λ分布的形状。用$I(\nu)$或$I(\lambda)$曲线表示原子吸收谱线轮廓。在理论上，一般都假设原子能级是无限窄的，因此有跃迁产生的辐射是单色的。实际上，处于激发态

的原子都有一定的寿命，又受到多普勒效应、洛伦兹效应和电磁效应等影响，实际观察到的原子吸收谱线都具有一定的宽度，甚至发生位移。

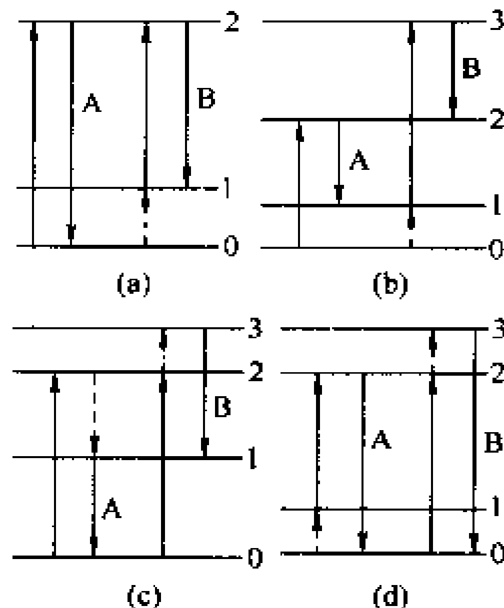
原子吸收线强度 intensity of absorption line 单位时间内单位吸收体积中待分析原子吸收辐射的总能量。在原子吸收光谱分析中，仅涉及基态原子对入射辐射的吸收。吸收辐射的总能量 I_a 等于单位时间内基态原子吸收的光子数，亦即产生受激跃迁的基态原子数 dN_0，乘以光子的能量 $h\nu$。根据爱因斯坦受激吸收关系式

$$I_a = dN_0 h\nu = B_{0j}\rho_\nu N_0 h\nu$$

式中，N_0 是单位体积内的基态原子数；B_{0j} 是受激吸收系数；ρ_ν 是入射辐射密度；h 是普朗克常数；ν 是吸收光子的频率。在通常的火焰和石墨炉原子化器的原子化温度高约 3000K 的条件下，处于激发态的原子数 N_j 与基态原子数 N_0 相比可以忽略不计。除了强烈电离的碱金属和碱土金属元素之外，实际上可以将基态原子数 N_0 视为等于总原子数 N，因此，原子吸收线强度可以写为

$$I_a = B_{0j}\rho_\nu N h\nu$$

原子荧光 atomic fluorescence 自由原子吸收了特征波长辐射之后被激发到高能态，再以辐射方式去活化时发射的辐射。原子荧光发射是各向同性的，属冷激发发光。当激发光源停止辐照试样之后，荧光发射随即停止。按其激发和发射的机理，可以分为三类：（1）共振原子荧光，其波长与激发辐射波长相同；（2）非共振原子荧光，其波长与激发辐射的波长不同，包括直跃线荧光、热助直跃线荧光、阶跃线荧光、热助阶跃线荧光、反斯托克斯荧光，后者的特点是其发射波长比激发波长短；（3）敏化原子荧光，是受激原子将激发能转移给另一原子使其激发，后者再以辐射方式去活化发射荧光。应用最广的是共振原子荧光。原子磷光也是光致激发原子再以辐射方式去活化时发射的辐射，它和原子荧光的区别在于，当激发光源停止辐照试样之后，磷光发射还要延续一段时间。各种原子荧光的产生过程如下图所示。



原子荧光产生的过程
(a) 共振荧光
A—起源于基态；B—热助共振荧光
(b) 直跃线荧光
A—起源于基态；B—起源于亚稳态
(c) 阶跃线荧光
A—正常阶跃线荧光；B—热助阶跃线荧光
(d) 反斯托克斯荧光
A—起源于亚稳态；B—起源于基态

原子荧光测汞仪 atomic fluores-

cence mercury-measured spectrometer 利用原子荧光光谱法测定汞含量的仪器。它利用汞离子与还原剂如 $SnCl_2$ 或硼氢化钾的化学反应被还原为元素态汞，用载气将汞蒸气带入低温原子化器中，通过测量汞蒸气在辐射能激发下所产生的荧光发射强度，来测定汞含量的一种分析方法。该法对汞的检出限可达 $pg \cdot ml^{-1}$ 数量级。

原子荧光淬灭效应 quenching effect of atomic fluorescence 激发态原子以非辐射方式去活化，例如将激发能转变为热能、化学能等，导致原子荧光量子效率降低，荧光强度减弱，这种现象称为原子荧光淬灭效应。

原子荧光光谱法 atomic fluorescence spectrometry; AFS 一种通过测量元素原子蒸气在辐射能激发下所发射的原子荧光强度进行元素定量分析的仪器分析方法。1964 年由温福德纳（J. D. Winefordner）和维克斯（T. J. Vickers）等首先提出。用作激发光源的有空心阴极灯和激光光源。用作原子化器的有火焰、石墨炉和电感耦合等离子体。原子荧光光谱与原子吸收光谱分析仪器基本相同，差别在于原子荧光光谱分析仪的检测器与激发光束不在同一直线上，通常成直角配置，以避免激发光源对检测原子荧光信号的影响。原子荧光光谱分析仪分色散型和非色散型两类。非色散型仪器没有色散元件，辐照立体角大，光谱通带宽，集光本领大，荧光信号强度大，仪器结构简单，但散射光影响大。在一定实验条件下和一定含量范围内，荧光强度与被测元素含量成正比。原子荧光光谱法的优点是检出限低，工作曲线动态范围宽，可同时进行多元素测定。

原子质量精确测定 exact determination of atomic mass 同位素的精确原子量值在原子物理核物理中有重要意义。采用质谱法测定原子的精确质量是原子质量测定的一个重要方法。测量精度可达到小数点后 6~8 位数。

圆二色谱电化学法 circular dichroism electrochemistry 研究在电化学过程中分子构象（特征手性）变化与电化学行为之间关系的专门方法。预计在生命科学研究中将会发挥作用。

圆二色性 circular dichroism 简称 CD。是物质对左圆和右圆偏振光吸收率不同的性质。圆二色性以对左圆和右圆偏振光的吸光系数之差 $\Delta\varepsilon = \varepsilon_L - \varepsilon_R$ 来量度，ε_L 和 ε_R 分别是物质对左圆和右圆偏振光的摩尔吸光系数；或者用椭圆率来表示。入射的平面偏振光通过介质，由于左圆和右圆偏振光被吸收的程度不同而变为椭圆偏振光。对于通过浓度为 c(g/100ml)，长度为 l(dm) 的溶液的平面偏振光，在某指定波长 λ 和温度 T 时，其椭圆率近似地为

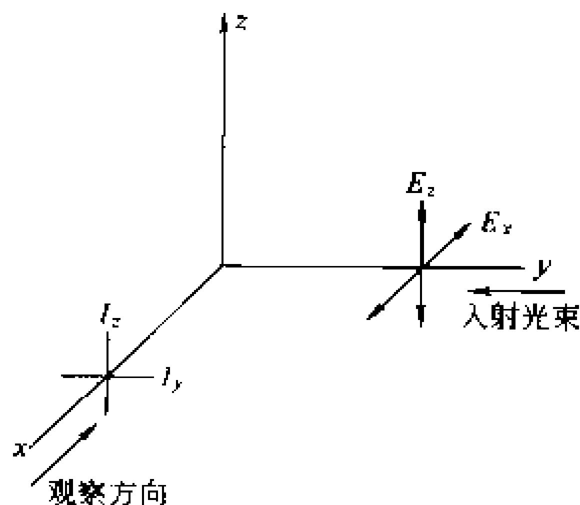
$$[\theta]_\lambda^T = 0.576lc(\varepsilon_L - \varepsilon_R)$$

圆二色性取决于生色基周围电荷分布的不对称性。用圆二色计可以测绘椭圆率 θ 对波长 λ 的关系图，称为圆二色性曲线或圆二色谱，化合物中有几

个生色基时就会出现几个相应的极大。应用圆二色性曲线可以研究物质的结构、构型和构象，尤其是它能提供一些有关有机和生物体系以及金属有机配位化合物的有用信息。

圆二向色性 circular dichroism 在某些晶体中，o 光和 e 光被晶体吸收的程度很不相同，这种现象称为二向色性。例如，电气石晶体对 o 光有强烈吸收，而对 e 光的吸收则很少。某些光学材料，对左、右旋的圆偏振光的吸收率不同，这种现象称为圆二向色性。圆二向色性是由于光学材料（或光学活性物质）分子中的不对称生色团与左、右旋圆偏振光的不同作用（光与分子间能量的交换不同）而引起的。根据圆二向色性制成的圆二色光谱仪可广泛地应用于有机化学、生物化学、药物等研究和分析工作中。

圆偏振光 circular polarization 即自然光。如下图所示，圆偏振光沿 y 轴方向入射照射样品，圆偏振光的电场强度可以分解成大小相等相互垂直



的两个分量 E_x 和 E_z，且有 $E_x = E_z = E$，因为光波是纵波，所以在其传播方向 $E_y = 0$。所以，圆偏振光就是 $E_x = E_z = E$，$E_y = 0$ 的入射光。

圆偏振射频场电子-核双共振 circularly polarized RF-electron-nuclear double resonance; CP-ENDOR 在常规 ENDOR 中，作为引起 NMR 跃迁的射频场使用的是线偏振磁场，所观测的是两个电子能级间的 NMR 跃迁。如果体系内存在多种磁性核，经常在很窄的频率范围内集中了大部分的 ENDOR 跃迁，造成识别跃迁归属的困难。此时，为了减少跃迁数的密度，使用圆偏振射频场，根据新的跃迁选律对跃迁进行分离和归属的方法就称为圆偏振射频场电子-核双共振。对于左圆偏振射频场和右圆偏振射频场，会分别得到不同的 CP-ENDOR 谱。与常规 ENDOR 谱比较，根据峰的产生与消失、峰强度的变化、峰位置的移动等，可以对不同核的 ENDOR 跃迁及其相应的磁量子数 m_S 进行指认。

圆筒模型 cylindrical model 在凝胶色谱（空间排阻色谱）中，将固定相上孔隙假想成圆筒状孔来讨论溶质分子保留机理的理论模型。它认为溶质分子能利用的孔体积是扣除从孔壁到相当于溶质分子半径的区域后剩下的空间，即分子半径大于孔隙半径的溶质不能进入孔中，即在死体积处最先流出色谱柱。显然，体积越小的分子，能利用的孔体积越大，在固定相中的保留时间也就越长。

圆形色谱法 circular chromatography 以圆形状物质为固定相，在其中心或中心附近的同心圆上负载样品，向固定相中心供给展开剂，使样品以同心圆的形状向周围展开的色谱方法。主要用于纸色谱和薄层色谱。

圆型纸色谱法 circular paper chromatography 是指以圆形色谱纸（滤纸）为固定相的纸色谱法。在纸上划出若干等份，样品点在每一份内靠近圆心的位置，展开剂放在有盖可密闭的平面皿底部，滤纸平放在皿的上部，纸中心穿一小孔放上纸芯（或棉芯）连通纸与展开剂，以便使展开剂通过纸芯渗透到纸上进行展开。展开后的斑点为弧形，这种方法比一般纸色谱法速度快，分离效果好，但接近溶剂前缘的一些组分点由于弧形较大，检出灵敏度较低。

圆柱状超微薄层色谱法 ultra micro TLC on a cylindrical support 为了增加TLC检测的灵敏度，可采用减少薄层厚度的方法，但过薄会产生边缘效应。将吸附剂涂布在微型玻棒上，可以消除这一效应。如同时利用荧光方法检测，用照相方法定量，可检测皮克（pg）级的物质。

圆锥模型 conical model 在凝胶色谱（空间排阻色谱）中，将固定相上孔隙假想成圆锥状孔来讨论溶质分子保留机理的理论模型。它认为固定相表面的孔隙越往里孔径越小，比圆锥入口处直径还大的溶质分子不能进入孔中，快速流出色谱柱。在那些可以进入孔中的分子中，体积越小的分子到达圆锥孔中的深度越大，在固定相中的保留时间越长。

圆锥四分法 coning-quartering method 采集分析物料中的一种缩分试样的方法。参见采样条。

源后裂解 post-source decay; PSD 质谱分析中，样品被电离后，从离子源的加速区域被引出，由于离子自身具有的过剩内部能量或者与残留气体之间的碰撞，在离开离子源之后，到达检测器之前的期间发生裂解，生成碎片离子，称为源后裂解。在单聚焦和双聚焦质谱仪中，源后裂解生成的离子叫亚稳离子。目前所称的源后裂解一般特指在基质辅助激光解吸电离-飞行时间质谱中发生的现象。

源内裂解 in-source fragmentation; in-source decay 在离子化同时或随后在电离室内（源内）发生裂解，产生碎片离子，称之为源内裂解。有时亦被称为瞬时裂解（prompt fragmentation）。

远程耦合异核相关谱 heteronuclear correlation spectroscopy via long range coupling; COLOC 脉冲序列如下

^{1}H 核　$90°(\phi_1)-\frac{t_1}{2}-180°(\phi_2)-\Delta_1+\frac{t_1}{2}-90°(\phi_3)-\Delta_2-$全去耦

^{13}C 核　————————$180°(\phi_4)$————————$90°(\phi_5)$——采集 FID(t_2)

Δ_1 用于发展小的远程耦合$^{n}J_{CH}$作用（Δ_1 取值为$\frac{1}{2^{n}J_{CH}}=50$ms，一般

取$^nJ_{CH}=10Hz$，$n\geqslant2$)，演化期中的两个180°脉冲实现两域异核去耦和F_1域同核去耦。COLOC实验可获得包括季碳在内的一键以上的远程C—H耦合信息，这种耦合以跨越氧、氮或其他原子的育能团将碳与相隔两键以上的氢相关联（如—CO—OCH中的H与酯基碳的相关或H_2N—C基的C—H相关等），从而建立C—X—C及C—X—H间的关联，确定小的分子片断。其谱图形式类似于C—H COSY谱，F_1域为δ（^1H），F_2域为δ（^{13}C），无对角峰，交叉峰会出现较强的$^1J_{CH}$相关峰外主要是出现$^nJ_{CH}$远程相关峰。它常常需要与C—H COSY谱相对照，以便扣除$^1J_{CH}$交叉峰，确证$^nJ_{CH}$峰。对确定季碳和具有杂原子的取代基的位置十分有用。与二维天然丰度双量子转移实验相比，它样品用量少、省时间、灵敏度高，是十分重要的常规的2D-NMR实验技术之一。

远程自旋耦合 long-range spin-spin coupling 又称长程自旋耦合。^1H-NMR谱中相隔4个或4个以上的键的两核间自旋耦合，若耦合常数$J\neq0$，则称为远程自旋耦合。通常通过σ键电子传递时^nJ值在0～3Hz，不易分辨，当经π电子传递时^nJ值较大。当核相间4～5个键且构成W形等折线型时^nJ值较大。

远红外分束器 far infrared beam-splitter 远红外分束器分为聚酯膜（Mylar film）分束器、固体（solid substrate或grid）分束器和金属丝网（metal mesh）分束器。聚酯薄膜分束器在远红外区产生干涉条纹，使得最低点的红外辐射透过很少，造成最低点附近区间的光谱无法测定。干涉条纹的宽度和出现的位置与聚酯薄膜的厚度有关，薄膜越厚，干涉条纹的宽度越窄。固体材料远红外分束器避免了多次更换不同厚度的聚酯膜，仅用一块分束器就可以测量650～20cm^{-1}远红外光谱区。固体分束器能透过远红外能量高于传统的Mylar膜分束器，克服了Mylar膜分束器的鼓膜效应和频繁更换分束器的麻烦。金属丝网分束器是改进了的Mylar膜分束器，将比6.25μm更薄的Mylar膜固定在金属丝网上，可测量650～30cm^{-1}远红外光谱。由于金属丝网挡住了一部分远红外辐射，使得远红外能量偏低，其单光束光谱的能量响应大约只有6.26μm Mylar膜分束器的一半。

远红外光谱学 far infrared spectroscopy 研究红外光谱在长波区（25～1000μm或400～10cm^{-1}）的红外辐射与分子的相互作用的行为。此光区内的吸收谱带大致分为三类：第一类是分子内部的振动，常涉及重原子之间的伸缩振动和弯曲振动，气体和液体分子的扭转振动及环状分子的环变形振动；第二类是分子间的振动，包括分子间的相互作用，如氢键振动和晶格振动等；第三类是气体分子的纯转动。它用于异构体，有机金属化合物（包括络合物）、氢键、吸附现象等的研究。由于对各类物质的

远红外吸收规律了解较少，远红外光谱的解释和谱带的指认要比中红外困难的多。

远红外光源 far infrared source 在远红外区一般采用两类光源：一类是适用于远红外高频波段测量的中红外区光源；另一类是高压汞弧灯光源。中红外区的光源适用于远红外区的 650 ~ 200cm^{-1} 波段。在此区间，光源的红外辐射强度还比较高。以硅碳棒光源为例，光源的相对能量在 600cm^{-1}处为 5×10^{-2}，而 200cm^{-1}处降为 1×10^{-3}。但 200cm^{-1}以下，下降很快。在 50cm^{-1}处已降到 5×10^{-7}。高能量高压汞弧灯光源发射的远红外辐射能覆盖整个远红外区。这种光源发射的低频红外辐射能量比中红外光源发射的低频红外辐射能量要高，尤其是在 100cm^{-1}以下。高压汞弧灯光源除了发射所需的远红外辐射外，还发射出极强的紫外光和可见光。测量时需选用合适的黑色聚乙烯滤光片，以滤除紫外光和可见光对测量的干扰。

远红外检测器 far infrared detector 远红外区通常使用带聚乙烯窗口的 DTGS 检测器和液氦冷却的电阻式量热辐射计（He-cooled bolometer）。DTGS 检测器在远红外区的灵敏度较低，水气对测量的干扰很大，需采取多次扫描累加的办法以改善信噪比。液氦冷却的电阻式量热辐射计有极高的灵敏度，它使用液氦冷却，在低温下金属接收面中的电子热运动噪声显著下降，其灵敏度和响应性能都大为提高，一般比 DTGS 远红外检测器提高灵敏度 10 ~ 100 倍。

远红外区 far infrared region 远红外区是指在中红外区和微波之间的电磁波区，波数范围 650 ~ 10cm^{-1}（15 ~ 1000μm）。分子在远红外光谱区的振动模式基本上有三种：（1）分子中重原子溴、碘等的伸缩和变角振动；（2）配位化合物和金属有机化合物中金属原子的振动；（3）分子骨架的变角和扭曲振动，分子的缔合、吸附及分子的转动。在远红外区，由于其振动模式比较复杂，给谱图解析带来一定的困难。这是因为远红外光谱区研究起步较晚，目前仍是一个待开发的领域，这与它的能量太低，测量条件又十分严格有关，特别是水蒸气的纯转动光谱几乎遍布了整个远红外区。

约定真值 conventional true value 对于给定的目的而言，被认为充分接近真值，可以代替真值的量值。在实际测量中，通常利用被测量的实际值、已修正过的算术平均值、计量标准器所复现的量值以及国际会议、标准化组织或国际上公认的量值作为约定真值。

约化耦合常数 reduced coupling constant 耦合常数 J 与耦合核的磁旋比 γ 的乘积成正比。为了比较不同核之间耦合常数的大小，定义约化耦合常数 K_{AB}：$K_{AB}=\frac{2\pi J_{AB}}{\gamma_A\gamma_B}$。这样 K_{AB} 仅决定分子结构，与磁旋比无关。利用 K_{AB}可计算分子结构相同的核间的

耦合常数。例如：结构相同的分子 CH_3—OH 与 CH_3—OD，已知 $^3J_{HH} \approx$ 5Hz，可推测 $^3J_{HD}$ 的大小。因为 $^3J_{HH} = \frac{K_{AB}\gamma_H\gamma_H}{2\pi}$，$^3J_{HD} = \frac{K_{AB}\gamma_H\gamma_D}{2\pi}$，所以有 $\frac{^3J_{HH}}{^3J_{HD}} = \frac{\gamma_H}{\gamma_D} = 6.51$，得出 $^3J_{HD} = 0.77$Hz。

跃迁几率 transition probability 每个原子在单位时间内发生的跃迁次数。

匀场线圈 shim coils NMR 对外加磁场的均匀度要求极高，人制作的磁场不可能理想地均匀，必须用匀场线圈产生微弱磁场梯度来抵消。磁场 z 方向的分布可用一组具有多阶梯度场的叠合而成。结合探头形状，人们设计了能产生这些梯度场的匀场线圈。超导谱仪的匀场有超导匀场和室温匀场。超导匀场的匀场线圈与六阶螺管一起浸在液氦中，工作于超导状态，它可使磁场均匀度达 $10^{-7} \sim 10^{-8}$，成为超导磁体的基础均匀度。另有室温匀场，匀场线圈装在探头上，室温下工作，有一阶到四阶项的修正，经此补偿磁场的均匀度可达到 10^{-9} 或更高。磁铁谱仪只有室温匀场，磁铁谱仪中样品旋转轴沿 y 轴，旋转样品不能平均掉 y 方向的磁场不均匀性，应特别仔细调节 y 方向的梯度场。在超导磁体中样品旋转轴与 z 轴重合，要仔细调节 z 方向的梯度场。

允许差 permissible errors 技术标准、检定规程等对计量器具和测量结果所规定的在一定置信度下所允许的误差极限值。分为室内允许差、室间允许差和标样允许差。室内允许差是同一实验室用同一方法对同一试样独立进行多次测定时在一定置信度下的极差允许界限。室间允许差是 m 个实验室用同一方法对同一试样各自独立进行 n 次测定所得到 m 个平均值在一定置信度下的极差允许界限。标样允许差是任一分析人员对标样进行 n 次独立测定所得到的平均值与标准值之间的绝对值的允许界限。允许差可用来衡量分析人员的分析结果是否准确，实验室内、实验室间的分析精密度是否符合要求。

运动变窄 motional narrowing 当自旋-自旋电子自旋间的偶极相互作用很小，可以忽略时，自旋-自旋弛豫时间 T_2 变大，此时 ESR 谱线的线宽主要由自旋-晶格弛豫时间 T_1 决定，即核自旋-电子自旋之间的偶极相互作用将起决定作用。该相互作用与 $(3\cos^2\theta - 1)\ r^{-3}$ 成正比。这里 r 是未偶电子与核之间的距离，θ 是 r 与外部磁场间的夹角。当分子快速运动时，$(3\cos^2\theta - 1)\ r^{-3}$ 实际上应是平均值起作用。显然，当分子做快速无规运动时，该平均值为零。也就是说，因分子的快速无规运动，发生了这样的平均化，使吸收线宽变窄，称作运动变窄。在黏度低的液体中分子做快速无规运动，就发生运动变窄，所以其 ESR 谱线的线宽一般都比较窄。相反，在黏度大的液体中，分子运动受阻，ESR 谱线变宽。

运动黏度 kinematic viscosity 在某一恒定的温度下，测定一定体积的液体在重力下流过一个标定好的玻璃毛细管黏度计的时间，黏度计的毛细管常数与流动时间的乘积，即为该温度下测定液体的运动黏度。在温度 t 时的运动黏度用符号 V_t 表示。定义为 η_t/ρ_t。其中，η_t 为动力黏度；ρ_t 为液体的密度。其单位为平方米·秒$^{-1}$（$m^2 \cdot s^{-1}$），化工中常用 $mm^2 \cdot s^{-1}$。过去使用厘米克秒制的单位为斯、厘斯。1 厘斯 = $1mm^2 \cdot s^{-1}$。

Z

杂散光 stray radiation 落在检测器上非所需波长以外的其他波长的光。杂散光强度以到达检测器的总能量或总功率的百分率来表示。杂散光的来源：（1）光学零件工作表面的余留反射光、非工作表面的多次反射光与光学零件内部缺陷所造成的杂散光；（2）仪器内部金属零件和内壁的多次反射光；（3）来自光栅的其他不需要级次的光；（4）直接到达检测器的旁光。杂散光降低仪器的测量精度，使谱线边缘不清晰，测出的吸光值比真实值低，造成光谱背景。短波部分杂散射光光强大，对辐射能量小的长波部分造成干扰影响较大。消除杂散光的措施有：使用挡光光阑和挡光板；将仪器内壁、金属零部件和光学零件的非工作表面涂黑；将主要结构密封以防止漏光；使用滤光片或前置单色器。

载流 carrier stream 在流动注射分析中，需要将液体样品注入到一个适当的、流动的、非间隔的液流中，这个液流就称为载流。根据化学分析的需要，可选择适当的溶液作载流，如去离子水、缓冲溶液或显色剂溶液等。通常选用无色溶液。

载气 carrier gas 在气相色谱法中，流动相为气体，称其为载气。载气的作用是以一定的流速载带气体样

品或经气化后的样品蒸气一起进入色谱柱进行分离，再将被分离后的各组分载入检测器进行检测，最后流出色谱系统放空或收集，载气只是起载带而基本不参与分离作用。常用的载气有氢、氦、氮、氩、二氧化碳等，对载气的选择和净化处理视检测器、色谱柱以及分析的要求而定。

载气净化器 carry gas cleanser 用来除去载气中的水分、有机物等杂质的一种设备。净化器一般为 2～4 支内径 50mm，长 200～250mm 的玻璃管或不锈钢管组成，管内依次装填硅胶、4A 或 5A 分子筛、活性炭等，以除去载气中的水分和净化载气中的烃类有机物等组分。所用的硅胶、分子筛、活性炭在装填前必须活化，否则没有净化效果。对载气纯度的要求主要取决于所用检测器、色谱柱和分析工作的要求。

载气流速 flow rate 在色谱柱出口的温度和压力条件下所测得的柱出口载气体积流速，以 F_0 表示，其单位是 $ml \cdot min^{-1}$。通常是采用皂膜流量计来测量载气的流速。

载气平均流速 average flow rate 在色谱柱柱温及平均压力下的平均体积流速，以 F_c 表示，其单位是 $ml \cdot min^{-1}$。

$$F_c = \frac{jF_0T_c}{T_r\left(1-\frac{P_w}{P_0}\right)}$$

式中，j 为压力梯度校正因子；F_0 为柱出口温度、压力下的载气流速；T_c、T_r 分别为以热力学温度 K 表示的柱温和室温；P_w 为测量时水的饱和蒸气压（用皂膜流量计测量载气体积流速）；P_0 为柱出口压力。

载体 carrier 在放射化学分离中，载体（carrier）是指为克服“低浓度效应”于分离前在样品中加入的能载带微量物质共同参与某种化学和物理过程的常量物质。在气态物质分离过程中，有时某气体生成物浓度并不很低，为了收集起见，将一种惰性气体引入系统内把某气体生成物一起载带出来，所引入的惰性气体称为载气。载体分同位素载体、非同位素载体、反载体和清除剂。同位素载体是被分离微量物质的同位素，加入的同位素载体应与被载带的微量物质应处于相同的化学状态或者两者能迅速进行同位素交换，常用于分离效率的测定，不适用于制备高比放射性活度的无载体核素。非同位素载体是与被分离微量物质化学性质相似，或者性质虽不同但生成某种独立相后对被分离微量物质具有强载带能力的物质，广泛用于制备高比放射性活度的无载体核素。反载体是加入到样品中的性质与放射性杂质相似的稳定核素或其混合物，以稀释放射性杂质不被载带。清除剂是加入到样品中能强烈吸附或载带除去许多放射性核素的物质。

载体沉淀 carrier precipitation 溶液中待测痕量元素（通常小于 $1mg \cdot L^{-1}$）以共沉淀方式或简单的机械载带作用被捕集到另一毫克量级沉淀物上的过程。这种沉淀物称为捕集沉淀

剂（collector precipitates）、载体（carrier）或聚集沉淀剂（gathering precipitates）。载体沉淀技术已广泛地用于富集淡水、海水和废水中痕量元素。

载体的钝化 deactivation of support 是指对载体表面进行的各种预处理，目的是减少或消除其表面存在的活性部位（参见**载体的活性部位**条），改善载体的表面性质和表面结构，以获得对称的色谱峰和较好的分离结果。钝化载体的方法依不同类型的载体和不同的分析任务而有所不同，常用方法有：酸洗法（参见**酸洗法**条）、碱洗法（参见**碱洗法**条）、硅烷化法（参见**硅烷化法**条）、釉化法（参见**釉化处理**条）以及其他钝化方法。

载体的活性部位 active site of support 载体表面那些能起吸附作用或催化作用的活性作用点。这些活性部位可能是硅藻土或硅胶类型载体表面的硅醇基（Si—OH），也可能是少量金属氧化物，分离时因表面存在氢键和酸、碱活性中心作用，造成峰形的拖尾或出现假峰。载体的活性部位随载体种类的不同而不同，在使用前应对载体进行预处理以改善或消除其活性部位。参见**载体的钝化**条。

载体涂层开口管柱 support coated open tubular column；SCOT 先在毛细管柱壁上涂覆一层硅藻土载体，然后再在其上涂渍一层固定液的色谱柱。参见**多孔层开口管柱**条。

载体柱吸附收集法 adsorption collection method on carrier column 是基于样品吸附作用而滞留在载体表面的一种收集技术。采用未涂固定相的载体石英棉或其他物质作为收集柱的填充物。此法对气相色谱馏分的收集十分有效。较常用的方法有两种：（1）用氩气冲洗收集器并使它和组分一起冷凝，然后再慢慢挥去氩气；（2）采用收集器回收法，适用于沸点150℃以上的样品。具体步骤为：将冷却棒浸入液氮中，收集管套上加热炉，底部对准压模上极少量 KBr 粉末，先抽真空再缓缓加热收集管，被收集在收集柱里的色谱馏分慢慢馏出，冷凝在低温的 KBr 粉上。

载脂蛋白 apolipoprotein 是由脂质（甘油三酯、磷脂、胆固醇）与蛋白质组成的复合物，称脂蛋白。脂蛋白中的蛋白质称载脂蛋白。

再残留限量 extraneous residue limit；ERL 或称外来残留限量。系指一些残留持久性农药过去曾经在农业上使用，现已禁用，但已构成了对环境的污染。来自环境中积累的这些持久性农药残留物，再次造成了对食品的污染，在食品和饲料中形成了残留。为了控制这类农药残留物对食品的污染，同时也为了防止对已禁用农药的误用或违规再使用情况的发生，特制定其在食品中的再残留限量，表示单位为 $mg \cdot kg^{-1}$。联合国 FAO/WHO 食品法典委员会所制定的再残留限量具有法规性，对人体健康方面被确认为食品中可允许接受的残留限量。国家行政当局组织监测，普查这类禁用农药在食品和饲料中的残留量

数据，作为制定再残留限量的依据。为保护人类安全和健康，限量标准能为各国所接受，以促进国际贸易为原则，确定法典再残留限量。当所提供的数据和资料不足以确定再残留限量时，则设置在特定期限内采用的暂定再残留限量（TERL）。

再生剂 regenerant 又称抑制剂。在离子色谱的抑制型电导检测法中，维持抑制器抑制功能的试剂。例如，在以碳酸氢钠为淋洗剂的阴离子交换色谱中，通常用稀硫酸（10~20mmol·L^{-1}）作再生剂，在抑制器中，淋洗剂转变成电导率低的碳酸，再生剂转变成硫酸钠而失去提供氢离子使淋洗剂转变成碳酸的能力，所以必须不断地提供稀硫酸溶液。在实际操作中，是用一个专门的高压输液泵向抑制器中连续输送再生剂溶液。

再现性 reproducibility 在任意两个实验室，由不同分析人员、不同仪器，在不同或相同的时间内，用同一分析方法对同一量进行两个单次测量按指定概率的容许差。其值为

$$R=1.96\sqrt{2}S_R=2.83S_R$$

若两个实验室各分别进行 n_1、n_2 次重复测定，则再现性为

$$R_n=\sqrt{R^2-r^2\left(1-\frac{1}{2n_1}-\frac{1}{2n_2}\right)}$$

式中，1.96 是置信度为 95% 时的置信系数；$\sqrt{2}S_R$ 是两实验室各进行一次测量所得到的测量值之间的差值的标准差；S_R 是实验室间测量的标准偏差。再现性反映了实验室间的系统误差与在重复测量条件下不会存在的其他的随机误差，是实验室间测量波动性的量度，可用来检查实验室间测量的精密度是否符合要求。若两实验室各进行一次测量所得到的测量值之间的差值小于容许差 R 或多次重复测量所得到的两平均值之间的差值小于 R_n，则认为测定的精密度合格；若差值分别大于容许差 R 或 R_n，说明测量的精密度不合格。

在线电堆集 on-line electrical stacking 使样品离子在柱上进样过程中得到富集的一种技术。当离子从高电场突然进入低电场时，会因减速堆积在电场交界处，导致区带缩短、浓度提高，有利于提高灵敏度和分离效率。

在线分析 on-line analysis 在线分析是当前过程分析采用的主要形式。多用某些自动连续监测仪器，放置在生产流水线旁，从生产流水线上引出一个旁路，令旁路中的样液自动流进或采进监测仪器，必要时仪器应含有试样温度调节和过滤等预处理设施，并进行连续监测。生产流水线的液流与样品流几乎同步进行，监测结果及时显示，甚至反控生产流程的配料比例，能发挥指导生产的作用。其信息的滞后情况取决于仪器的分析速度和自动化程度。

在线实时检测 on-line real time detection 这是过程分析化学所追求的理想目标。指生产流水线与在线检测同步进行，检测迅速无滞后。分析物的瞬间浓度变化能够瞬间测得，且

可长期连续跟踪进行，特别有利于指导生产。

在线脱气装置 on-line degasser 在输液泵之前对流动相进行连续脱气的装置。对使用多元梯度泵的色谱仪，因几种溶剂是先在低压（大气压）下混合后再泵入色谱体系，低压混合过程中容易形成气泡，影响色谱分析的重现性和分离效果，通常需在线脱气之后再进入色谱泵。在线脱气多采用真空脱气技术，也有采用惰性气体鼓泡吹扫脱气技术的。

在线预浓集 on-line preconcentration FIA 预浓集的原理是将大体积试样经适当分散后流经微型柱，使分析物浓度局部增加到可被直接检测，或洗脱成一个很小的体积。例如，离子交换预浓集，可转换 10ml 的样品体积成 0.1ml，待测物组分也就被浓缩了 100 倍。因浓缩过程在测定之前进行，故称预浓集。

在柱电导率检测 on-column electrical conductivity detection 用 CO_2 激光在垂直毛细管轴线方向上打一对 40μm 内径并成 180°夹角的小孔，将一对铂电极准确地放置进去并使其恰好相对。用细绝缘导线连接电极，用有孔的塑料套管作保护套构成在柱电导率检测池。

暂定每日允许摄入量 temporary acceptable daily intake; TADI 在一定期限内所采用的每日允许摄入量。对于暂定每日允许摄入量转化为每日允许摄入量，要求在特定的期限内补充制定 ADI 所需的该农药化合物的生化、毒理学、毒性、安全因子等资料。与 ADI 值相比，TADI 值中所引用的安全因子值较大。TADI 值提交审定期不得迟于所定期限中 JMPR 举行首次会议的时间。

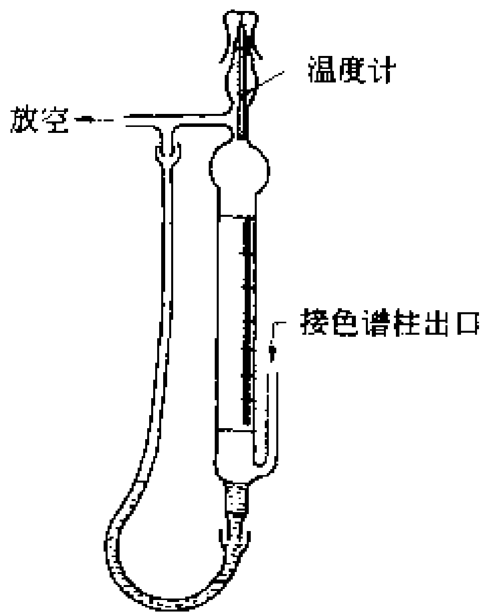
暂定最高残留限量 temporary maximum residue limit; TMRL 在特定的期限内所规定暂定采用的最高残留限量。JMPR 规定以暂定最高残留限量替代前期延用的暂定允许量。凡遇下列情况之一者，均对此农药设立为暂定最高残留：对已经设立暂定或限制性的每日允许摄入量的农药品种或虽然已经设定了每日允许摄入量的农药品种，但对其所提供的残留试验资料和数据，尚不足以设定正式的最高残留限量者。

暂态方法 transient method 考虑了时间因素，利用各基本过程对时间的不同响应，达到研究各基本过程和控制电极总过程的目的方法。主要用于研究电极过程动力学和电极反应机理。常用的暂态方法有计时分析法、线性扫描伏安法、循环伏安法以及交流技术等。

皂化值 saponification value 在规定条件下，中和并皂化 1g 试样时所消耗的以毫克为单位的氢氧化钾质量数（$mg \cdot g^{-1}$）。皂化值表示在 1g 物质中游离的和化合在酯内的脂肪酸的含量，是矿物油、氧化蜡、含蜡油等油品的一项质量指标。一般说来，化合在酯内的脂肪酸的分子量较小或游离的脂肪酸的数量较大，则皂化值较高。测定时，加入过量的氢氧化钾乙

醇溶液，加热充分皂化后，再用标准酸溶液反滴定。

皂膜流量计 soap film gas meter 气相色谱中最常用来测量色谱柱出口载气流速的一种计量管式玻璃仪器，如下图所示。管的下端装有皂液，当载气流入计量管时，制成皂膜，载气顶着皂膜自下而上地匀速移动，用秒表测定皂膜在两刻度之间（对应一定体积）移动所需的时间，即可计算出柱出口载气的体积流速，测量精度可达1%。



噪声 noise 由于各种未知的偶然因素所引起的基流无规则的起伏变化，通常是在色谱图上表现为基线无规则的上下波动，故也称基线噪声（baseline noise），以 N 来表示，通常用mV为单位来度量。噪声太大就会掩蔽检测器的响应信号。

噪声监测 noise monitoring 凡是干扰人们休息、学习和工作的声音以及其他不规则的声振动，统称噪声。噪声监测包括对各种噪声源、噪声场基本特性参量的测量和使用的各种仪器及相关技术手段。噪声测量常用的仪器有声级计、频率分析仪、自动记录仪和磁带记录仪。声级计在噪声监测中最常用，也是最简便的测试仪器。声级计有三种常用的频率计权网络，称A、B、C计权网络。为了测量飞机的噪声，现在有的声级计又增加了D计权网络。噪声测试一般使用A计权网络，因为A网络的频率计权特性，与人耳对噪声的感觉基本相同。在噪声测量中，不用频率分析仪，只要读出声级计A、B、C三档，就可粗略地估计该噪声的频率特性。当声级 $L_A = L_B = L_C$ 时，噪声声能主要在高频段；当 $L_A = L_B > L_C$ 时，该噪声为中频特性；当 $L_A > L_B > L_C$ 时，则该噪声为低频特性。

噪声污染监测 noise pollution monitoring 对干扰人们学习、工作和生活的声音及其声源进行的监测活动。其主要工作内容为：城市各功能区噪声监测、道路交通噪声监测、区域环境噪声监测和噪声源监测等。噪声监测结果一般以A计权声级（简称A声级）表示，记作dBA。以A声级为基础发展起来的等效声级、统计声级等已成为绝大多数国家对噪声进行主观评价的主要指标。必要时，还需对噪声进行频谱分析。开展噪声污染监测所用

的主要仪器是声级计和频谱分析器。噪声污染监测结果用于分析噪声污染的现状及变化趋势，也为噪声污染的规划管理和综合整治提供基础数据。

择优溅射 preferential sputtering 溅射多组分样品时可能引起样品表面平衡组分变化的现象。由于离子束对每种元素的溅射产率不同，因此很容易造成溅射产率高的元素容易过度地被溅射掉，而溅射产率低的元素在样品表面富集。为了降低择优溅射效应，应该适当增加离子枪的溅射速率，每次均可以把表面原子全部剥离掉。

增稠剂 thickeners 可提高食品的黏稠度或形成凝胶，从而改变食品的物理性质，赋予食品黏稠、适宜口感，并兼有乳化、稳定或呈悬浮状态的物质。天然来源的增稠剂大多是由植物、海藻或微生物中提取的多糖类物质，如阿拉伯胶、卡拉胶、果胶、琼胶、海藻酸类等。

增强因子 enhancement factor 用表面增强拉曼光谱（SERS）测得分子某一谱峰的强度与用普通拉曼光谱测得同一拉曼谱峰强度之比，是衡量表面增强拉曼光谱增强效果的一个指标。增强因子一般可达 $10^4 \sim 10^7$，最近单分子的 SERS 可达 $10^{14} \sim 10^{15}$。SERS 大大改善了拉曼光谱的质量。

增强紫外-可见吸收检测技术 UV-visible absorption enhanced detection technique 在毛细管电泳紫外-可见吸收检测中，毛细管的光程短限制了它的灵敏度。为了进一步降低吸收检测限，提出许多有关扩展吸收光程和提高吸收检测灵敏度的新技术和新方法，如矩形池、泡形池、Z 形池、多次反射池、轴向吸收池等。

增色作用 hyperchromism 对光谱变化的一种描述，指增大吸收强度的作用。

增塑剂分析 analysis of plasticizer 聚氯乙烯塑料中通常加邻苯二甲酸二辛酯（DEHP）作为增塑剂，以改进塑料的柔软性和耐寒性，并改善加工性能。但美国癌症研究所（NCI）认为高剂量的 EDHP 有致癌作用，因此，需要对聚氯乙烯中的 DEHP 进行测定。目前，聚氯乙烯中 DEHP 的测定通常采用索氏抽提，然后用液相色谱法测定。美国 ASTM D3421-75 标准采用索氏抽提，以四氯化碳-甲醇作为提取剂，提取时间 16h，最后用气相色谱法测定。国内检验检疫局采用超声波抽提，以三氯甲烷作提取剂及溶剂，能使 PVC 中的 DEHP 迅速溶解到三氯甲烷溶液中，再用气相色谱测定，方法简便快速，最小检出量为 $12.5 mg \cdot kg^{-1}$。

增味剂 flavour enhancers 又称风味增强剂。是补充或增强食品原有风味的物质，我国历来称为鲜味剂。按其化学性质的不同主要分为二类，即氨基酸类和核苷酸类。在氨基酸类鲜味剂中，我国仅使用谷

氨酸钠一种，国外尚许可使用L-谷氨酸，L-谷氨酸铵、L-谷氨酸钙、L-谷氨酸钾及L-天门冬氨酸钠等。目前我国批准使用的增味剂有谷氨酸钠、5-鸟苷酸二钠、5-肌苷酸二钠、5′-呈味核苷酸钠和琥珀酸二钠等。

增效分析试剂 enhanced analytical agent 指在对分析中能产生增溶、增敏、增稳及改善条件等增效作用的试剂。物质特性的表现，既决定于物质的本性，也受物质所处环境的影响。各类表面活性剂、环糊精、聚电解质、水溶性高分子等，在单独或按一定比例混合使用时，常能给分析物质提供性质特异的介质环境，从而起着上述增效作用。

窄粒度分布 narrow particle size distribution 指微粒状物质粒径分布范围窄，即微粒大小比较均匀。在色谱法中，填料的粒度分布范围对色谱分离性能影响很大，粒度分布越窄，色谱分离效率越高。

展开 development 在纸色谱和薄层色谱法中，将点样一端的色谱纸或薄层板浸入选好的展开溶剂中，由于毛细上升作用溶剂被吸入色谱纸或薄层板中，随即样品斑点被溶剂载带着不断上升，由于样品中各组分上升的速率不同而彼此分离，此过程称为展开。展开的方式有上行展开法，下行展开法，径向展开法，双向展开法等。

展开槽 developing tank 是进行纸色谱或薄层色谱展开时所用盛放展开剂的不同材质、不同形状容器的统称。将纸或薄层板放在盛有展开剂槽内，加盖封闭后进行色谱展开。上行展开时，展开剂放在槽底，其运行方向自下而上。下行展开时，槽内放支架，将装有展开剂的容器放在槽的上部，使展开剂的运行方向自上而下。

展开槽饱和 chamber saturation 与柱色谱不同，平面色谱分离过程是在两相未充分平衡的状态下进行的，除固定相与流动相外，气相也参加了展开过程，展开槽的饱和程度对分离有明显的影响。所谓展开槽饱和，是指展开前及展开中溶剂系统中所有组分在整个槽内气体空间达到饱和状态。通常的操作是将展开剂蒸气在展开槽中预平衡一段时间，否则容易出现“边缘效应”，参见**边缘效应**条。

展开剂 developer 展开剂是指在纸色谱法或薄层色谱法中作为流动相载带样品斑点进行展开的溶剂。展开剂可以是单一的溶剂，也可以是混合溶剂。

占据表面态 occupied surface state 是指样品表面被电子占据的表面态叫占据表面态。表面态是指局域在表面上的电子能态。

章动谱 nutation spectroscopy 用一个单脉冲作用于自旋体系，此时电子在绕外磁场进动的同时也绕着微波磁场进动，即进行章动。改变微波脉冲的宽度（t_1），可测定不同 t_1 时的自由诱导衰减（FID）曲线，先后对FID和 t_1 进行两次傅里叶变换，就可得到二维的章动谱。在CW-ESR谱

中，如各向异性裂分或零场分裂峰的分辨率不够，则无法确定自旋体系的总自旋量子数 S；而章动谱主要用途就是通过谱峰位置的实测值与理论值的比较，可确定总自旋量子数 S。

照度 illuminance 物体被照明程度的度量单位，定义为 $E=\frac{dF}{dA}$，即照射到表面一点处的面元上单位面积的光通量除以该面元的面积所得的值。

照明系统 illuminating system 在光谱分析中，光谱仪所获得的谱线实际上是狭缝的影像。为保证谱线的质量，必须使狭缝得到良好的照明，所采用光学系统称为照明系统。照明系统要求光源发出的光较多地进入狭缝，又要使狭缝各点的照明均匀，同时还要使入射光束充满准直物镜。通常有如下几种照明系统：无透镜照明，单透镜照明，双透镜照明，三透镜照明，交叉圆柱面透镜照明等。

折射 refraction 当光或声波等物质从一个介质进入另一个密度不同的介质中时产生的转向或折回。

折射定律 refraction law 光在两种介质界面上会发生折射，入射光能从入射介质部分折射入第二介质中。光折射过程遵循的规律称为折射定律，即：折射光在入射光与界面法线构成的平面中（三者共面），而且折射线与入射线分居法线两侧，折射线与法线的夹角 r（折射角）与入射线与法线间的夹角 i（入射角）之间必然满足关系式 $\frac{\sin i}{\sin r}=\frac{n_2}{n_1}$ 或 $n_1\sin i=n_2\sin r$，式中，n_1 和 n_2 分别为入射介质和折射介质对入射单色光的折射率。

折射分析仪器 refraction analyzer 利用折射定律制成的各种分析仪器，例如根据介质折射率与介质中某种成分的浓度存在线性（或某种确定的非线性）关系，由折射率的测定而获知浓度的仪器（例如量糖仪）；因折射率 n 与介质的密度 ρ 存在确定的关系，因而可用折射分析仪器检测介质密度并进而推知其他分析数据（例如玻璃中硅含量、植物油的不饱和度等）。

折射率检测器 refractive index detector; RID 又称示差折光检测器。参见示差折光检测器条。

赭曲毒素 *ochratoxin* 赭色曲霉属（*ochraceors*）和几种青霉属真菌产生的一种毒素，其中以赭曲毒素 A 毒性最大。产生赭曲毒素 A 的曲霉属主要是淡褐色曲霉属（*A. alutaceus*），硫磺色曲霉属（*A. Sulphureus*）。菌核（*A. sclerotium*）和蜂蜜味曲霉属（*A. melleus*）也能产生赭曲毒素 A。曲毒属产生赭曲毒素 A 的条件是中温、寒冷气候，青霉属产生赭曲毒素 A 的地区主要是亚热带。在储藏的谷物中，经常发现有青霉属真菌，尤其是北欧和加拿大，淡褐色曲霉属真菌普遍存在于绿咖啡豆和咖啡制品中，咖啡豆、大豆、玉米、大米中也有发现。因此，一般容易

感染赭曲毒素A的商品有大豆、绿豆、绿咖啡豆、酒、啤酒、葡萄汁、调味品、草本植物、猪肾。赭曲毒素A已经被证明对动物的肾产生损害，也是一种致癌物质，国际癌症研究机构IARC将其定为2B类致癌物。当浓度为1μg·g^{-1}左右时，使家禽的产蛋率下降；超过5μg·g^{-1}时，会对肝脏组织和肠产生损坏。赭曲毒素的检测方法包括：薄层色谱法、HPLC、酶联吸附免疫法、免疫亲和柱-荧光法、免疫亲和柱-HPLC法等。

褶积差滤波 convolution difference filter 褶积差滤波函数为$g(t)=1-a\cdot\exp\left(-\frac{bt}{T_{CD}}\right)$，式中，$T_{CD}$为该函数的时间常数，设定为对$T_2$长的衰减慢的信号都消除掉，只留下$T_2<T_{CD}$的快衰减而谱线很宽的背景信号，并从原来的信号中减去背景信号，剩下慢衰减的部分。主要用于消除生物样品和液晶里常遇到的背景信号，在二维谱中可用来部分抑制绝对值尾部信号；在同核相关谱中可减小对角峰的强度，增强交叉峰。

褶皱振动 puckering vibration 见**骨架振动**条。

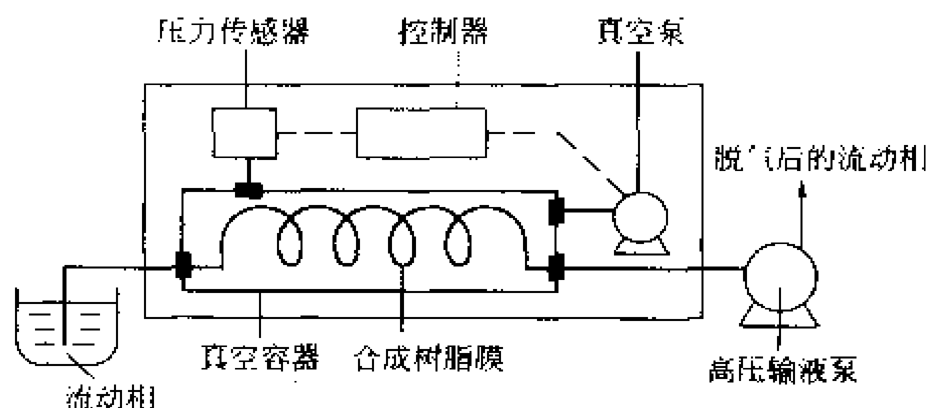
针尖电化学 tip electrochemistry 又称为纳米电化学。来源于电化学扫描隧道显微术。其主要特点在于将研究对象缩小在单分子的尺度。

真菌毒素分析 mycotoxin analysis 真菌毒素是一类由真菌产生的毒性二次代谢产物，目前已知的约有200种，可分为曲霉菌毒素、青霉菌毒素、镰刀菌毒素等几大类。真菌毒素能引起人类及动物产生急性或慢性中毒，并有致畸、致癌和致细胞突变的作用。现已证实有14种以上的真菌毒素具有致癌作用，如黄曲霉毒素、杂色曲霉素、棒曲霉素等。分析方法主要是色谱分析、免疫化学分析及荧光光度分析等，前处理方法包括萃取法、固相萃取法及免疫亲和柱法等。

真空能级 vacuum level 以自由电子能级为参照基准的原子轨道结合能，即把电子从所在轨道移到完全脱离核势场束缚所需的能量。

真空熔融色谱法 vacuum fusion (gas) chromatography 一种对金属或合金中所含气体进行定性和定量分析的色谱方法。其原理是：将待测样品置于石墨坩埚内，在高真空下用高频感应等方法加热使样品熔融，释放出所含气体，释放出的气体被收集到一个固定容器内，然后通过进样装置送入气相色谱系统进行分离、分析。这些气体一般有H_2、N_2、CO，有时还有少量甲烷。

真空脱气装置 vacuum degasser 使流动相通过一个抽真空的装置脱除其中溶解气体的一种脱气装置。其原理如下页图所示，是将流动相通过一段由多孔性合成树脂膜制造的输液管，该输液管外有真空容器，真空泵工作时，膜外侧被减压，分子量小的氧气、氮气、二氧化碳等溶解气体就会从膜内进入膜外而被脱除。



真空脱气装置的原理图

真空蒸涂 vacuum evaporation 在扫描电镜的样品制备中，为了增加样品表面的导电性，一般要在样品表面蒸镀导电层。经常采用的是蒸碳和蒸金。蒸金的导电效果好，但金颗粒较大，会影响样品的高倍数图像的观察。在这种情况下，真空蒸碳可以改善表面导电粒子的颗粒度，对高分辨率图像的观察影响较小。

真空紫外源 vacuum ultraviolet radiation source 在光电子谱仪设备中产生紫外光的装置，通常采用的是He、Ne等气体放电中产生的共振线，其光子能量在10～40eV之间。由于这种光子能量能使一切固体物质中的价带电子激发，因而没有可以透过的窗口材料，在大气中又易被吸收，故只能在真空中传播。由于该类紫外线是在真空放电时所产生的，因此称为真空紫外源。

真值 true value 被测量的值本身所具有的真实大小。真值是客观存在的。在实际测量中，由于存在测量误差，人们不可能测得真值，但在排除所有测量上缺陷的条件下，通过完善的测量所得到的量值充分接近于真值，对于给定的目的来说，可用以替代真值。在测定值遵循正态分布的条件下，算术平均值可以作为真值的无偏估计值，随着测定次数的增多，算术平均值越逼近真值。人们通常所说的真值，是指理论真值（如三角形的内角之和等于180°）、约定真值（国际会议、标准化组织或国际上公认的量值）和相对真值（如标准物质证书上给出的量值）。

诊断生物化学 diagnostic biochemistry 临床生物化学领域中的主要内容。它的任务在于开发和应用临床生物化学的检验方法和技术，并对检验结果的数据及其临床意义作出评价，用以帮助临床对病情的判断和各种层次上的诊断。

阵列表面声波传感检测器 array surface acoustic wave sensor 表面声波（SAW）是一种沿弹性基体表面传播的声波，其振幅随压电基体材料深度的增大按指数规律衰减。SAW技术是声学与电子学的结合，已制成的各类SAW器件（如滤波器、振荡

器、固定延迟线等）已广泛应用于军、民电子产品中；作为灵敏的传感元件还可用作物理、化学传感器，应用于物理参数和化学成分的分析检测。表面声波化学传感器有SAW气体传感器和SAW液相传感器两类；采用各种气敏涂膜材料覆涂在SAW器件表面，已实现了对H_2O（湿度）、O_2、H_2、NO、CO、NO_2、NH_3、CO_2、SO_2、H_2S、香味物质、各种挥发性有机物等微量组分的分析测定；在大气监测、污染防治、工业过程控制领域，SAW微量化学传感器及其阵列具有灵敏度高、响应快、可靠、低成本等一系列优点；将模式识别、主成分分析、神经网络分析等化学计量学方法引入SAW传感器及其阵列应用，可进一步拓宽分析应用范围，进行多组分同时分析、实现阵列信号实时处理，因而可快速、实时获得更大量分析信息。

阵列检测器 array detector 由一系列小尺寸敏感元件按一维（线阵）或二维（面阵）规律排列并同时工作的检测器。与传统单一检测器的本质区别有两点：一是具有位置检测能力，各个阵元检测信号可单独处理并给出相应此阵元的位置信息，因此可作为光谱检测器对分列的各条谱线单独检测；二是具有成像能力，投射到二维光电检测器（例如CCD检测器）上的光强分布图形，可给出相应二维分布的电子图形，因而不但能给出每一阵元上的信号强度信息，而且由所有阵元信号构成的二维分布是入射光学图像的真实反映。

阵列毛细管电泳 capillary array electrophoresis 将多根毛细管排列成阵列同时进行毛细管电泳的分离技术。

振动耦合 vibrational coupling 当两个化学键振动的频率相等或相近并有一公共原子时，由于一个键的振动通过公共原子使另一个键的长度发生改变，产生“扰动”，从而形成强烈的振动相互作用，称为振动耦合。互相耦合的振动必须具有相同的对称性。振动耦合导致振动频率发生变化，一向高频移动，一向低频移动。氯乙烯这种平面分子，面内振动与面外振动就不能互相耦合。

振动松弛 vibrational relaxation 在凝聚介质中，处于激发单线态（S_1，S_2，…）的分子通常其过剩的能量是以振动能的形式失去，并具有相应电子能级中的最低振动能级的Boltzmann热分布，这一过程称为振动松弛。振动松弛过程很快，约在$10^{-9}\sim10^{-12}$s内发生。振动松弛的能量是通过分子碰撞以热的形式释放给溶剂等环境介质。

振动-转动光谱 vibrational-rotational spectra 在低压气体分子吸收红外光后，使其振动量子态与转动量子态同时发生改变，被激发产生的光谱称为振动-转动光谱。采用高分辨率仪器记录，可看到振动吸收是由一系列转动线所组成。当分子处于凝聚态时，由于邻近分子的相互作用，振动谱带上的转动结构

消失而变成一个吸收谱带。它可以用来考查谱带的形状和计算转动精细结构间的距离，获得分子中原子核间的距离及键角，分子对称性和振动与转动之间的相互作用，以至核自旋方面的信息。

振子强度 oscillator strength 表征原子或分子体系的吸收或发射特定频率辐射能力的物理量。分吸收振子强度和发射振子强度，通常是指吸收振子强度。它直接正比于原子对特定频率辐射的吸收或发射几率。吸收振子强度 f_{ij} 与爱因斯坦受激吸收系数 B_{ij} 之间的关系是 $f_{ij}=\frac{hm_e\nu}{\pi e^2}B_{ij}$，发射振子强度 f_{ji} 与自发发射跃迁几率 A_{ji} 的关系是 $f_{ji}=\frac{m_e c}{8\pi^2\nu^2 e^2}A_{ji}$，且 $f_{ij}=\frac{g_i}{g_j}f_{ji}$。式中，$h$ 是普朗克常数；g_j 和 g_i 分别是跃迁上、下能级的统计权重，其数值等于简并在同一能级中的量子态数目，决定了多重线中各谱线的强度比；ν 是谱线的频率；c 是光速；m_e 是电子质量；e 是电子电荷。

蒸发光散射检测器 evaporative light-scattering detector; ELSD 基于溶质的光散射性质的检测器。它由雾化器、加热漂移管（溶剂蒸发室）、激光光源和光检测器（光电转换器）等部件构成。色谱柱流出液导入雾化器，被载气（压缩空气或氮气）雾化成微细液滴，液滴通过加热漂移管时，流动相中的溶剂被蒸发掉，只留下溶质（样品），激光束照在溶质颗粒上产生光散射，光收集器收集散射光并通过光电倍增管转变成电信号。因为散射光强只与溶质颗粒大小和数量有关，而与溶质本身的物理和化学性质无关，所以 ELSD 属通用型和质量型检测器，适合于无紫外吸收、无电活性和不发荧光的样品的检测。其灵敏度与载气流速、汽化室温度和激光光源强度等参数有关。与示差折光检测器相比，它的基线漂移不受温度影响，信噪比高，也可用于梯度洗脱。

蒸发曲线 evaporation curve 物质的蒸发速度可用实验方法测定，蒸发速度随蒸发时间的变化曲线，称为蒸发曲线。

蒸馏 distillation 利用液体中各组分挥发性的不同用以分离液体混合物的方法。将液体混合物加热使之沸腾，所产生蒸汽中含有比原来液体更多的易挥发组分，而在剩余的液体中则含有更多的难挥发组分，因而使混合物中各组分得到部分乃至完全分离。蒸馏方法很多，主要有简单蒸馏、精馏、恒沸蒸馏、萃取蒸馏、水蒸气蒸馏、真空蒸馏和分子蒸馏等。广泛用于化学、石油、食品、冶金和原子能等工业中。

蒸馏回流比 distillation refluence ratio 蒸馏过程中，液体样品被加热并转变成蒸汽时，其中有一部分被冷凝而回到原来的蒸馏瓶中。其余的被冷凝而转入收集瓶中。前者称回流液，后者称为馏出液，回流液的量与馏出液的量的比叫做回流比。

$$回流比=\frac{N_r}{N_d}$$

式中，N_r 为回流液的摩尔数；N_d 为馏出液的摩尔数。回流比影响分离产品的纯度。分馏柱的比表面积和长度，温度、压力以及阻力可调节回馏比。

蒸气放电灯 vapour discharge lamp 一种热阴极放电管。石英管内封有钨电极、小量惰性气体和分析元素，在电极上施加一定的电压后惰性气体开始放电，使分析元素蒸发，随着蒸气浓度的增加，逐渐过渡到在分析元素蒸气中进行放电，产生分析元素的共振辐射。特点是辐射强度大，信噪比高，共振线轮廓因自吸产生变形，随电流密度增大，表现出明显的谱线自蚀。它早期用作碱金属、汞、铊、锌、镉等易挥发元素的辐射光源，用于原子吸收光谱分析，现在已很少使用。

蒸气相干扰 vapour-phase interference 由于气相中共存组分的影响导致分析元素的解离、自由原子的电离和激发的改变而引起的干扰。火焰中的 O、OH、CH、H 的浓度取决于火焰自然成分之间的反应，喷入样品对它们与火焰气体组分之间解离平衡的没有影响，不会产生蒸气相干扰。如果分析元素以卤化物存在，它容易挥发，但不一定完全解离，其解离程度受温度的影响，因此在低温火焰中其解离干扰是严重的。有机化合物的喷入，影响火焰中的 H、C_2 自由基的浓度，从而影响蒸气相中分析元素的还原过程导致蒸气相干扰。在蒸气相中比较普遍发生的干扰是电离化学干扰，其干扰程度取决于分析元素的电离能、火焰温度和共存组分。在火焰原子化器中，激发态原子数小于1%，激发干扰可以忽略不计。

整群抽样 cluster sampling 将样品总体中各单位划分为若干样品群，再从各样品群中随机抽取整群样品。例如，进行产品检验，每隔 4 小时或 8 小时抽取 1 小时生产的全部产品进行检验。整群抽样的优点是抽样方法简便，缺点是抽取的样本在总体中分布不均匀，代表性差。

整体性质检测器 integral property detector 又称溶液性能检测器。基于柱流出物(含溶质的流动相)整体上的物理或化学性质的检测器。如电导检测器就是一种整体性质检测器，它测定的是柱流出物整体的电导率变化。其他整体性质检测器还有示差折光检测器、介电常数检测器等等。由于流动相本身也有响应，因此易受环境温度、流动相流速等实验条件的影响。

整形脉冲 shaped pulse 射频波除了矩形脉冲之外的，特定的时域函数如高斯型、半高斯型函数进行输出幅度调制的脉冲，具有某种特定的形状，故称为整形脉冲或特形脉冲。主要用于产生所需要的激发频谱，实现不同区域的选择性激发。有的实验还需要对射频脉冲的相位进行线性调制。利用它也可以以一维谱的形式比较精确地摄取二维谱中所含的信息，因此可以减低多维 NMR 实验的“维”数，也可

抑制溶剂峰等。

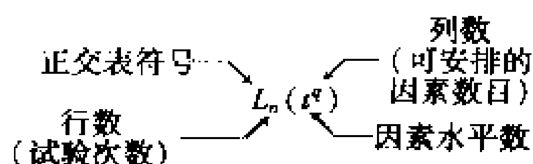
正比计数器 proportional counter 一种检测 X 射线能量总和的充气检测器，其工作电压控制在气体放大因子与外加电压曲线上的正比区内。正比计数器有封闭式和流气式之分，外壳一般以黄铜或不锈钢制成并开有 X 射线窗口，内壁呈圆筒型，圆筒的中央是一根极细的金属丝作为阳极，金属外壳作为阴极。入射的 X 射线光子与筒内的气体分子碰撞，引起初级电离，在外加电场作用下，经气体放大后，产生输出脉冲。正比计数器的输出脉冲幅度正比于初级电离数 N_0，即正比于入射 X 射线光子的能量。其特点是构造简单，能量分辨率较高而死时间较短。

正常分析区 normal analytical zone 是等离子体焰炬被人为划分的区域之一。等离子体焰炬分为三个区域：焰心区（又称预热区）、内焰区、尾焰区。其中内焰区就是正常分析区，又称标准分析区、测光区。正常分析区在感应圈上 10～20mm 左右处，淡蓝色半透明的炬焰，温度约为6000～8000K。试样在此原子化、激发，通常生成一价和二价离子，然后发射很强的原子线和离子线。这也是光谱分析中所利用的最适合的观测区。

正常塞曼效应 normal Zeeman effect 当原子的电子数目为偶数，且诸电子的自旋方向相反时，这时自旋量子数 $S=0$，$J=L$（J 为内量子数，L 为角量子数），故朗德因子 $g=1$，且 $M_J=M_L$。M_J 的取值为 $0,\pm1,\cdots,\pm J$，共有 $2J+1$ 个取值。由量子力学理论计算表明，除了 $M_J=0$、±1 三种情况之外，M_J 取其他值的跃迁几率都小到可以忽略不计。因此，每一条谱线在磁场中分裂为三条组分。对于正常塞曼效应，垂直于磁场与平行于磁场观察的结果是不同的。当垂直于磁场方向观察时，看到谱线分裂为三个组分，均为平面偏振光，位于中间的 π 组分的电向量的振动方向平行于磁场方向，位于两侧的 $\sigma^{\pm}$ 组分的电向量的振动方向垂直于磁场方向。垂直于磁场观察的结果，称为横效应（transverse effect）。当平行于磁场观察时，看不到电向量的振动方向平行于磁场方向的 π 组分，只能观察到电向量的振动方向垂直于磁场方向的 $\sigma^{\pm}$ 组分，这种观察结果称为纵效应（longitudinal effect）。

正常糖耐量 normal glucose tolerance 正常空腹静脉血葡萄糖含量 3.9～6.1mmol·L^{-1}，口服 75g 葡萄糖（成人）后 30～60min 葡萄糖水平达到高峰，峰值 <10mmol·L^{-1}，3h 后又恢复到空腹水平。表明机体处理糖负荷的能力良好，称正常糖耐量。

正交表 orthogonal layout; orthogonal table 利用正交特性所设计的试验安排表。它具有以下两个基本性质：(1) 任意一列中因素各水平的出现次数相同；(2) 任意两列所构成的水平对中，每个水平重复出现次数相同。正交表各个符号的意义如下



用正交表安排试验有两个明显的优点，一是因素之间搭配均匀，试验点分布均衡，这种特性称为均衡分散性；二是试验中各因素水平按一定顺序有规律地变化，各个因素的各水平出现次数相同，而由于非均衡分散性可能带来的其他因素对欲考察因素的影响相互抵偿，只要简单比较因素各水平的平均值便可以估计因素各水平的主效应，这一特性称为整齐可比性。均衡分散性与整齐可比性在数学上称为正交性。

正交多项式回归 orthogonal polynomial regression 用正交多项式表安排试验与回归分析处理数据。它与用最小二乘法配置的一般多项式回归不同，其回归系数的估计是相互独立的，若统计检验某一因素没有显著性影响，只要从正交多项式回归方程中删除该因素的回归系数项，而无需对其他的回归系数重新进行计算，大大地减少在建立最优回归方程过程中的数据处理工作量。

正交函数分光光度法 orthogonal function spectrophotometry 一种用一组 K 次正交多次式来展开和描述分光光度吸收曲线的方法。对于任意一条吸收曲线，可将其波长安排成等间隔，并由一个 K 元线性回归方程来展开和描述它。可将该拟合曲线分解为 K 条不相关吸收曲线，找出其中对混合吸收曲线贡献最大的一条吸收曲线，将其从混合组分吸收中分离出来，以此实现对待测组分的定量分析。该法能分辨重叠谱线、优化分析测定条件、简化操作。

正交检波 quadrature phase detection 为克服相检波不能辨认射频频率 f_0 为中心的正负频率信号，采用两个相位差为90°（称之为正交）的相检波器同时对 f_0 两边的信号分别进行检测，因为 f_0 两边的信号相位符号不同，可将它们组合起来进行复数傅里叶变换检出真实的信号，而不致发生折叠峰，这就是正交检波。利用正交检波技术时脉冲中心频率可设在观测谱的中心。与相敏检波相比具有明显的优点：降低了对射频发射机的强度要求，可减小一半，功率可减小到原来的四分之一；接收机谱宽减小一半；避免谱线失真；提高灵敏度$\sqrt{2}$倍，取样速率减小一半，节省了数据信号存储空间。

正交晶系 orthorhombic system 一种低级晶系、晶体所属点群的特征对称性是在互相垂直的方向上具有二次对称性（对称面或二重对称轴）。正交晶系的晶胞参数之间的关系为 $a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90°$，选取晶胞时应使三个晶轴平行于二重轴或垂直于对称面。正交晶系有四种可能的布拉维格子——正交简单格子、正交底心格子、正交体心格子和正交面心格子。

正交试验设计 orthogonal design of experiment 又称正交试验法。是用正交表安排多因素试验的方法。用正交表安排试验的特点：（1）因素之间搭配均匀，试验点分布均衡，相对于全面试验而言，虽然它只是部分试验，

但对其中任何两因素来说，它又是具有相同重复次数的全面试验，得到的试验结果能基本上反映全面试验的情况，但试验工作量大大减少了；（2）试验中各因素水平按一定顺序有规律地变化，各个因素的各水平出现次数相同，而由于非均衡分散性可能带来的其他因素对欲考察因素的影响相互抵偿，只要简单比较因素各水平的平均值便可以估计因素各水平的主效应，数据处理工作大大简化；（3）可以考察因素之间的交互效应和估计试验误差。正交试验设计提高了分析测试工作的效率和质量，在分析测试中有广泛的应用。

正离子 positive ion 带有正电荷的离子，例如，M^+，$[M+H]^+$，$[M+Na]^+$ 等。

正切公式 tangent formula 在测定晶体结构的直接法中，用于计算几率最大的相角值的公式。对于非中心对称晶体，正切公式的表达式为

$$\mathrm{tg}\alpha_{hkl} \approx \frac{\sum \omega_{h'k'l'}\omega_{h-h',k-k',l-l'}|E_{h'k'l'}E_{h-h',k-k',l-l'}|\sin(\alpha_{h'k'l'}+\alpha_{h-h',k-k',l-l'})}{\sum \omega_{h'k'l'}\omega_{h-h',k-k',l-l'}|E_{h'k'l'}E_{h-h',k-k',l-l'}|\cos(\alpha_{h'k'l'}+\alpha_{h-h',k-k',l-l'})}$$

式中，α 为相角；E 为归一化结构因子，ω 为加权因子，脚标为衍射指标。利用正切公式对相角关系式所推导的结果进行检验、修正，经多次循环，可使相角值越来越精确。引入加权因子是为了使循环过程加快收敛。

正确度 correctness 表示测量结果中系统误差大小的程度。已定系统误差可用修正值来修正，未定系统误差可用不确定度来估计。在我国的分析文献中不采用正确度而采用准确度表征测定中的系统误差。参见**准确度**条。

正态分布 normal distribution 又称高斯分布。是法国数学家 de Moivre 于 1733 年提出的，1809 年德国数学家高斯（C. F. Gauss）在研究天文学的观测误差时推导出正态分布曲线，亦称高斯误差定律。若随机变量是由为数众多相互独立的各随机因素的微小影响叠加而成，则该随机变量表现为正态分布。在分析测试中，测量值是以概率取值的随机变量，在大量观测中所得到的测量值的概率分布遵循正态分布，其期望值为 $E(x)=\mu$，方差为 $D(x)=\sigma^2$。正态分布的概率密度函数

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

记为 $N(\mu,\sigma^2)$。正态分布的概率密度函数是单峰曲线，关于 $x=\mu$ 对称，在 $x=\mu$ 时有最大值，在 $x=\mu\pm\sigma$ 处有两个拐点，当 $x\to\infty$ 时，$\varphi(x)\to 0$，曲线与 x 轴所夹的面积为 1。可用 μ 和 σ^2 两个基本参数来表征它，μ 确定了分布曲线中心在 x 轴上的位置，表征测定值的集中趋势，σ 表示分布曲线沿 x 轴的散布，表征测定值的离散特性。给定了正态分布的特征参数 μ 与 σ，正

态分布就被完全确定。它可用来估计各种测定值出现的概率。正态分布是大量测量值的理论分布曲线，但在实用上，当测量值数目大于30时，通常可用正态分布近似描述测量值和测量误差的分布特性。当$\mu=0$与$\sigma=1$时，此时的正态分布称为标准正态分布，记为$N(0,1)$。其概率密度函数为

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

正态概率纸 normal probability paper 一种依标准正态分布而制作的用来检验测量值正态性的专用坐标纸。横坐标是等距刻度的，表示测量值，纵坐标是累积概率值。若测量值在坐标纸上分布近乎为一条直线，可认为测量值为正态分布。遵从正态分布$N(\mu,\sigma^2)$的随机变量x，经过$u=\frac{x_i-\mu}{\sigma}$变换后，遵从标准正态分布$N(0,1)$，其累积概率

$$P=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{u}\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)du$$

由标准正态分布表知道，当$u=0$，$x_i=\mu$，$P=0.5$；当$u=-1$，$x_i=\mu-\sigma$，$P=0.1587$；$u=1$，$x_i=\mu+\sigma$，$P=0.8413$。因此，由纵坐标$P=0.5$所相应的横坐标可以得到特征参数μ值，由纵坐标$P=0.1587$或$P=0.8413$所相应的横坐标得到$\mu-\sigma$和$\mu+\sigma$值，从而求得特征参数σ值。

正态性检验 normality test 对一组测量值是否具有正态分布特性所进行的检验。许多统计检验方法都是建立在测量值遵从正态分布的基础上，但在有些情况下，如被测定量值分布范围特别宽或含量特别低（痕量和超痕量分析），测量值并不总是遵从正态分布。因此，在进行数据处理时，若事先不知道测量值的分布类型，需先对测量值进行正态性检验。检验的方法有：正态概率纸法；威尔克-夏皮罗检验法，适用于样本容量$3<n<50$的场合；χ^2检验法，适用于样本容量$n>50$的场合；偏度-峰度检验法，适用于样本容量$7<n<5000$的场合；柯尔莫哥洛夫检验法与维斯捷利乌斯置信带法，既适合于大样本又适合小样本的检验。当样本容量$n<10$时，各种检验方法的效果都不够理想。

正相关 position correlation 在回归与相关分析中，因变量值随自变量值的增大（减小）而增大（减小）的现象。这时表示相关程度的相关系数为正值。

正相高效液相色谱法 normal phase high performance liquid chromatography；NP-HPLC 是由含极性有机基团的固定相和非极性（或弱极性）溶剂流动相所组成的色谱体系。其代表性的固定相是硅胶或改性硅胶，代表性的流动相是正己烷。早期的液相色谱中曾广泛采用这种体系。

正相离子对色谱法 normal phase ion-pair chromatography 使被测离子

与离子对试剂结合生成中性的离子对化合物后，采用正相分配色谱的模式进行分离的离子对色谱方法。实际应用中，正相体系采用得较少。

正相毛细管电色谱　positive capillary electrokinetic chromatography　根据固定相和液体流动相相对极性的差别，毛细管电色谱可分为正相毛细管电色谱和反相毛细管电色谱。当固定相的极性大于流动相的极性时，称为正向毛细管电色谱。

支撑双层磷脂膜　supported bilayer lipid membrane　利用磷脂分子的极性端与支撑载体表面之间的特殊相互作用以及磷脂分子之间的疏水相互作用在载体表面形成的双层磷脂膜。同平板双层磷脂膜相比，其稳定性大大提高。

支持电解质　supporting electrolyte　(1) 一个电解质溶液，它的成分在所研究的电位范围内，是非电活性的，因此有时也称为惰性电解质，它的离子强度通常远大于溶解的电活性物质的浓度；(2) 存在于上述溶液中的溶质。在电化学实验中，支持电解质主要是用来消除迁移电流的影响。

织构　texture　多晶材料中晶粒的择优取向现象。多晶材料（或晶体粉末）是由许多晶粒（或颗粒）组成的，如果这些晶粒的空间取向是完全无规的，则该多晶材料的宏观性能就应该是各向同性的。然而，一般多晶材料经过轧制、拉伸、挤压、拔丝等形变过程后，各晶粒的空间取向会出现某些规律性，导致材料的宏观性能呈现各向异性，此时，称该多晶材料中存在着择优取向，或织构。

织构分析　texture analysis　以X射线衍射技术测定多晶样品中晶粒择优取向的分析方法。多晶材料中晶粒的择优取向现象叫做织构，织构导致材料的宏观性能呈现各向异性。金属材料中出现织构不但影响其力学性能，而且其磁性、导热性也都有相应的变化，所以有时能够利用织构为材料带来一些特殊的性能。利用配有专用附件的多晶衍射仪测定样品，指定衍射在空间不同方向上的强度，就能确定样品的织构。一般用极图、反极图或晶粒取向分布函数等手段定量地表示被测样品的织构。

脂类的氯仿-甲醇提取法　extract of esters by chloroform-methanol　一种测定结合态脂类含量的方法。将样品与氯仿-甲醇(体积比＝2∶1)混合溶液，形成水/甲醇/氯仿三元抽取体系，在水浴上加热65℃回流1h，使结合态的脂变成游离态脂，并可提取出磷脂，滤液经蒸发除去溶剂后得脂肪含量，此方法适用于磷脂含量高的样品。

脂质双层　lipid dilayer　为生物膜的基本结构，由两个脂质单层复合构成，中间为疏水区。脂质双层的基本组成成分是脂类，根据脂类骨架结构的不同，可将其分为脂肪、磷酸甘油酯、鞘磷脂、糖类和类固醇等5大类。

脂质体 liposome 一种人工制造的具有双层包膜的脂质小囊，被用作生物膜研究模型和生物的分子与药物的运载体。脂质体按性质分为两类，一类称为普通脂质体（conventional liposomes），在体内行为难以控制，其作用无特异性，应用受限制；另一类为构象稳定脂质体（sterically stabilited liposomes），它同核酸和细胞膜有高的反应性且被免疫系统识别提取的机会较少，故用于基因治疗和肿瘤治疗有一定前景。阳离子脂质体（即lipofectin 和 lipofectamine）能富集DNA，并且在体外转染细胞的效率比一般的脂质体可提高几个数量级，故被广泛用于转染。

脂质体发光 liposome luminescence 不饱和脂肪酸的自氧化，使脂质体膜产生自发的超微弱发光的现象称为脂质体发光。脂质体由卵脂等不饱和脂肪酸所组成。若将含有细胞色素 C 的过氧化氢加入到脂质体悬浮液中以加速膜的氧化，则可以明显地增强发光。各种脂质体发光随着所含不饱和脂肪酸的不饱和度而异。

直方图 histogram 一种直观地表示数据统计分布特性的图示方法。将一组总数为 n 依数值大小顺序排列的测量值，按一定组距细分为 $m=1.52(n-1)^{\frac{2}{5}}$组，以出现在各组内的测量值的数目（即频数）或其与测量值总数之比（即相对频数和频率）为纵坐标，以分组的边界值为横坐标画成的矩形分布图。以频数为纵坐标者，称为频数分布直方图，以相对频数为纵坐标者，称为相对频数或频率分布直方图。频数分布直方图各组频数之和等于测量值的总数，相对频数或频率直方图各组相对频数或频率之和为 1。用线段连接频数或相对频数直方图各矩形上方的中点得到的曲线，相应地称为频数和相对频数曲线。当测量值的数目足够多，分组的组距极小，频率逐渐趋于一个稳定值（即概率），频数和相对频数曲线变成平滑的曲线，所得到的平滑曲线分别称为频数和频率分布曲线。

直接测量法 direct method of measurement 不必测量与被测量有函数关系的其他量，而能直接得到被测量的量值的方法。例如，用等臂天平称量物体质量，在滴定分析中用滴定管测量滴定所消耗的滴定剂的容积。根据计量器具的示值通过查对图表以确定被测量值的测量，亦属于直接测量。如用 pH 计测量溶液中的氢离子浓度，根据测得的 pH 值，查表得出溶液中氢离子浓度仍属于直接测量。

直接插入固体进样 directly interjected sample introduction 将固体样品装入一个装样杯（石墨或金属材料），直接插入 ICP 中心管，依靠 ICP 炬焰进行蒸发气化。其优点是可分析粉末样品；缺点是进样装置复杂，影响光源稳定性。

直接法 direct method 晶体结构测定中破解相角问题的一种重要方法。依据下列电子密度分布的特性，作为处理问题的出发点：(1) 晶胞中任何一处的电子密度都不应为负值；(2)

每个原子的电子集中分布在原子核周围100pm的半径范围内；（3）电子密度分立地分布，不互相重叠。利用数学统计方法和有关的公式，将隐含在结构振幅中的相角信息挖掘出来。随着计算机技术的飞速发展，这种方法已经成为当前测定小分子晶体结构的主要方法。

直接弧烧法 method of direct arc combustion 用直立电极进样时常用的蒸发激发方法。采用石墨电极，上电极为锥形，下电极为杯形。试样经简单处理后，装入石墨电极杯孔，然后用直流或交流弧光激发。

直接化学结合法 directly chemical combination 将电极表面先经过化学处理或修饰，然后将生物功能物质以共价、离子或配位等方式结合固定于电极表面而制成传感器的方法。

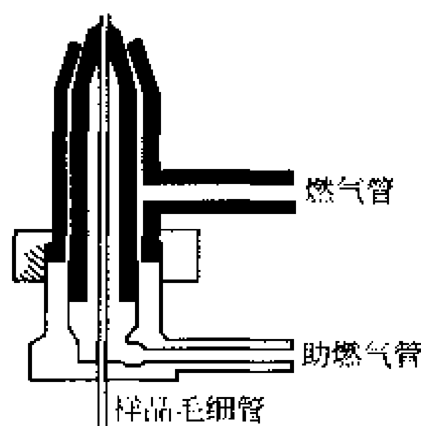
直接化学离子化 direct chemical ionization GC-MS直接进样中，常规是样品需首先挥发，然后经电子轰击或化学离子化进行质量分析，不适合用于热不稳定性样品的分析。经过改进的直接进样杆将样品暴露在紧靠电子束处，可避免常规直接进样杆的样品蒸发过程，此时，如用化学离子化，则产生的试剂气离子撞击进样杆顶端的样品，使之解吸和离子化。这种方法可用于难挥发、热不稳定样品的分析，称直接化学离子化。

直接激光在柱吸收检测 on-column direct laser detection 激光直接作为毛细管电泳检测的光源，进行在柱吸收检测。

直接抗球蛋白试验 direct antiglobulin test 在体内已结合了抗体的红细胞经过洗涤以后，用抗球蛋白血清进行检测，发生凝集则提示红细胞已于体内被不完全抗体所包被。有两种可能，一是胎儿有核红细胞增多症，其红细胞已被母亲的抗体所包被；二是自身免疫性溶血性贫血，自身抗体已吸附到了红细胞上。

直接免疫荧光技术 direct immuneo-fluorescence technology 免疫荧光屏技术分为直接法和间接法和补体法3种。直接免疫荧光是荧光抗体技术最简单和最基本的方法。滴加荧光抗体于待测标本上，经反应后在显微镜下观察。若有相应的抗原存在，即与荧光素标记的抗体结合，在镜下可见有荧光的抗原抗体复合物。本法的优点是特异性高，受非特异荧光干扰少。缺点是每检查一种抗原，必须制备与其相应的特异性荧光素标记抗体，且灵敏度较低。

直接喷入式燃烧器 directly jet combustor 即全消耗型燃烧器。火焰发射光度法燃烧器中的一种，由两个同心管组成，燃气和助燃气分别从这两个同心管进入喷嘴（见下页图）。燃气与助燃气实际上是在火焰中混合，因此产生了显著的声学和光学的扰动。由于助燃气在喷嘴处的压降，样品溶液通过中心垂直的毛细管被吸喷进入燃烧器，然后直接雾化进入火焰，这种燃烧器又被称为全消耗型燃烧器。其最大优点是其结构简单、造价低、安全、不可能发生回火等。



直接谱 integral spectroscopy 在俄歇电子能谱中，直接以俄歇电子能量 E 为横坐标，以能谱密度 N (E) 为纵坐标的俄歇电子能量分布曲线叫直接谱，也称积分谱。直接谱的缺点在于非俄歇电子的其他次级电子的信号可能会淹没俄歇电子的信号；其优点是俄歇谱中的化学效应信息不会失去，可以通过扣背景等方法把该类信息提取出来。对于现代俄歇电子能谱仪，由于采用计算机系统，一般采集直接谱。

直接湿片检查 direct antiglobulin test 在清洁的玻片上加上等渗水，将一些标本放在载物片上，加上盖玻片直接在显微镜下检查，称为直接湿片检查。如检测皮屑、头发等有无真菌时，即将皮屑放在载物片上，加一滴10%氢氧化钾，稍加温使其透明，盖上盖玻片后即可直接在显微镜下观察。

直接荧光法 direct fluorescence method 如果被测定的物质本身发荧光，便可以通过测定含该物质稀溶液的荧光强度，利用荧光定量关系式可以直接测定其浓度，这种方法称为直接荧光法。如果待测物本身无荧光，则需要采用间接荧光法或对待测物进行荧光衍生后进行测定。

直接蒸馏法 direct distillation method 一种测定土壤中铵态氮的方法。在半微量定氮蒸馏装置中，利用氧化镁水悬浮液的弱碱性，与样品中的铵态氮作用生成氨，直接蒸馏出的氨被硼酸吸收，用标准酸进行滴定，由滴定结果计算土壤中的铵态氮含量。方法操作较简便，能克服许多干扰因素（如强还原性水稻水），测定结果较好，由于氧化镁是弱碱，对简单的有机态氮有微弱的水解作用，通常可以忽略不计。

直立电极法 method of upright electrode 发射光谱分析进样技术之一，以试样直接作为电极，分为上、下垂直两电极。弧光-火花光源经常采用直立电极进样方式。电极的制作包括装样法、压片法、熔珠法、干渣法和金属直立电极法等。

直流等离子体自激振荡发生器 direct current plasma self oscillator 由供电源、高频振荡器及控制回路三部分组成，是直流等离子体光源的一个组成部分，用来引燃等离子体。它的工作基础是由电感和电容并联组成的振荡回路。振荡回路的频率与电容值、电感值及两臂的电阻有关。此振荡回路如达到输出所要求的功率还须经过功率放大。

直流等离子焰 direct current plasma source 是等离子体光源中最早用于光谱分析的一种。它是直流电源供电

而形成的等离子体，工作气体为氩气。圆桶形密封室上部为环形阴极，下部棒状为阳极，工作气体氩气由切向进入经阴极中心喷出，在室内产生直流放电，加热氩气形成等离子体由上口喷出形成喷焰。试样由阳极中心孔喷入。由于受热箍缩效应及磁箍缩效应的影响，提高了弧焰温度，一般温度可达 8000～10000K。

直流电弧光源　direct current arc light source　光谱分析中常用的激发光源之一。利用直流电在分析间隙发生电弧放电时产生的高温来激发样品的光源。其发生器通常由整流线路、弧光线路和引燃线路组成。直流电弧引燃可用两种方法：一种是接通电源后，使上下电极接触短路引燃；另一种是高频引燃。供电电压为 220～380V，电流为 5～30A。直流电弧由弧柱、弧焰、阳极点、阴极点组成。阳极斑点温度高，可达 4000K，阴极斑点温度低，可达 3000K，电弧温度约为 4000～7000K。直流电弧的优点是设备简单，由于持续放电电极头温度高，蒸发能力强，绝对灵敏度高，适用于定性分析和难熔元素的定量分析。缺点是电弧不稳定、易漂移，因此重现性较差。弧层较厚，自吸现象较严重。

直流极谱法　direct current polarography　由滴汞电极（每滴 3～7s）和参比电极组成的电解池，以缓慢线性变化（0.1～0.2V · min^{-1}）的直流电压通过电位计加于电解池上，由灵敏检流计记录其电解电流。直流极谱法适用于分析在汞电极上还原或氧化的有机物或无机物，浓度范围为10^{-2}～10^{-5}mol · L^{-1}，两个极谱波的半波电位至少相差 100mV 才能分开。

直跃线原子荧光　direct-line atomic fluorescence　当原子由基态激发到较高激发态后，经历辐射跃迁下降到高于基态的另一激发态，此时发射出比所吸收的辐射波长长的荧光，称为直跃线原子荧光。

植物分析　plant analysis　包括植物营养诊断和组织分析。采集不同生长期某部位的组织或植株，测定植物营养元素的全量或可溶性养分含量，包括测定硝态氮、铵态氮、无机磷等。测定作物从土壤和肥料吸收各营养元素的量和施肥效应，判断作物体内的养分状况，找出营养元素的诊断指标，为确定施肥时间和用量提供依据。植物分析也是农产品品质检定项目。

植物品质测定　quality determination of plant　对农作物及果蔬类收获物等样品中的有机营养成分进行定量分析的过程。这里说的植物品质测定，仅指营养品质而言，包括糖类、蛋白质、脂肪、氨基酸、维生素等含量。在人们的膳食中，有 80% 左右的热能和 60% 左右的蛋白质是由粮食供给的，供给的 B 族维生素及矿物质也占有较大的比重。油料作物为人类提供 90% 以上的食用植物油脂。测定油料作物籽粒品质以总脂肪含量及必需脂肪酸组成作为营养品质的主要指标。水果和蔬菜除了含有丰富的糖类、有

机酸、矿质元素以外，还有人体必需的各种维生素、氨基酸等，因此，对作物产品进行品质分析十分重要。

植物叶绿素测定 determination of chlorophyll in plant 叶绿素有多种形态，通常分析叶绿素的总量、叶绿素a、叶绿素b的含量，有破坏性测定和非破坏性测定两种方式。破坏性测定需从植株上摘下叶片然后研磨提取叶绿素，可用丙酮+水（体积比4:1）的溶剂萃取叶绿素，在663nm、645nm波长下分光光度法测定叶绿素的含量。活体叶片的非破坏性直接测定，是利用叶片在波长760nm（λ_1）处有一吸收峰，在波长750nm（λ_2）的峰底为参比波长，可用双波长法测定叶绿素的含量。测定活体叶片中叶绿素含量的测定仪就是基于上述原理制成的。

植物营养元素的测定 determination of nutrient elements 对植物、土壤和肥料等样品中的矿质营养元素进行的定量分析的过程。植物为其生长发育需要，从环境吸收物质，这些物质称为营养元素，包括大量元素C、H、O、N、P、K、Ca、Mg、S和微量元素Fe、B、Mn、Zn、Cu、Mo、Cl，共计16种必需元素，此外，还有一些元素只是某些特定植物需要的有益元素，如Co、Si等。它们是土壤与农业化学分析的常规分析项目，尤其是N、P、K三要素的测定。

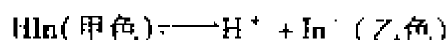
纸色谱法 paper chromatography 是指以含有吸附水分的色谱纸为固定相（或使用浸渍甲酰胺、缓冲液等改性的纸为固定相），以不与水相混溶的有机溶剂为流动相的色谱方法。样品以斑点的形式点在纸的一端，然后在密闭的槽中用适宜溶剂进行展开，由于各组分被溶剂载带移动的距离不同而得到互相分离的斑点，纸色谱法的分离机理主要属于分配色谱。对展开后的色谱斑点用显色或其他适宜方法确定其位置和大小，以进行定性和定量分析。

指标化 indexing 对所记录的衍射谱图中每一条衍射给出衍射指标的过程。因为晶体的衍射图谱给出了在特定的波长下一个完整的衍射空间，所以，通过对衍射的指标化，可以确定晶胞参数，布拉维格子，晶体点阵中可能存在的对称元素及其组合，以及对称元素的平移操作特征，从而确定晶体结构所属的、可能的空间群（衍射群）。

指导性限量 guideline level; GL 当一种农药尚未制定出每日允许摄入量，或仅设定了暂定的每日允许摄入量，经过按照良好规范而设定的这类农药在商品中残留的最大浓度。为行政部门所推荐或作为法定限量使用，单位为$mg \cdot kg^{-1}$。

指示剂 indicators 分析中用于指示滴定终点的试剂，它在滴定反应的化学计量点附近产生能敏锐觉察到的颜色或沉淀等变化，从而指示滴定终点的到达。依据滴定反应的类别不同，可分为酸碱指示剂、金属指示剂、氧化还原指示剂和沉淀滴定指示剂。

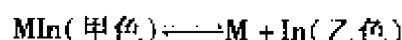
指示剂变色点　indicator transition point　容量滴定法中，将具有两种明显不同颜色的指示剂型体浓度相等，滴定体系呈现这两种颜色的混合色时的对应测量点称为指示剂变色点。例如，对酸碱指示剂



$$\mathrm{HIn}(\text{甲色}) \rightleftharpoons \mathrm{H}^+ + \mathrm{In}^-(\text{乙色})$$

$$K_a = \frac{[\mathrm{H}^+][\mathrm{In}^-]}{[\mathrm{HIn}]}; \text{则} \frac{[\mathrm{In}^-]}{[\mathrm{HIn}]} = \frac{K_a}{[\mathrm{H}^+]}$$

当$\frac{[\mathrm{In}^-]}{[\mathrm{HIn}]} = 1$时，$\mathrm{pH} = \mathrm{p}K_a$，滴定溶液呈现甲、乙两种色的混合色，此时的pH称该酸碱指示剂的理论变色点。对配位滴定指示剂



$$\mathrm{MIn}(\text{甲色}) \rightleftharpoons \mathrm{M} + \mathrm{In}(\text{乙色})$$

$$K'_{\mathrm{MIn}} = \frac{[\mathrm{MIn}]}{[\mathrm{M}][\mathrm{In}']}$$

$$\lg K'_{\mathrm{MIn}} = \mathrm{pM} + \lg \frac{[\mathrm{MIn}]}{[\mathrm{In}']}$$

当$[\mathrm{MIn}] = [\mathrm{In}']$时，滴定溶液呈现甲、乙两种色的混合色，$\lg K'_{\mathrm{MIn}} = \mathrm{pM}$，此时的pM称该配位滴定指示剂的理论变色点。由于$K'_{\mathrm{MIn}}$将随溶液pH而变，故配位滴定指示剂的变色点不像酸碱指示剂的变色点那样，有一个确定不变的变色点。

指数滤波　exponential filter　数据处理中数字滤波的一种方法。一般只应用于一维NMR实验中，它是将指数函数与自由感应衰减（FID）信号相乘，再经FT后得到频谱图。若乘的是正指数函数则衰减变慢，分辨率提高，但要损失灵敏度；若乘负指数函数，则衰减变快，分辨率下降，灵敏度却增加。

指数生长期　exponential growth　在迟缓期以后，是细菌分裂繁殖最快的时期，一般仅有几小时，菌数以几何级数增长。此期的细菌代谢活跃，生长速率高，群体中的细胞化学组成及形态、胜利特征比较一致，通常在生产上作为种子菌，实验室多采用指数齐细菌作为实验材料。

指数式流动　exponential flow　在色谱分析中，若进样速度比较慢，样品在进入色谱柱进口端时不断被流动相所稀释，其浓度随时间呈指数式下降，直至浓度为零。样品的这种流动方式使初始谱带的宽度加宽，不利于组分之间的分离。

指纹区　fingerprint region　所有的单键的伸缩振动频率和骨架振动频率，部分含氢基团的一些弯曲振动和一些含重原子的双键的伸缩振动频率都位于910～1300cm^{-1}之间，苯环因取代而产生的吸收谱带位于650～910cm^{-1}之间。在650～1300cm^{-1}区域的吸收峰反映了大多数有机化合物分子的具体特征，犹如人的指纹，称为指纹区。指纹区可以用来鉴别未知化合物。

制备色谱　preparative chromatography　指以获得一定量某种（或某类）物质纯样品为目的的液相色谱方法。根据制备量的大小选择适当的色谱条件（柱尺寸、流动相流速等）。实验室规模（毫克至克级）的制备通常采用内径20～30mm的制备柱，流动相流速大约在20～30ml·min^{-1}。通常是先用简单的分离方法

（如溶剂萃取）进行初步分离纯化后再采用制备色谱进一步分离纯化。

制备色谱仪　preparative chromatograph　利用液相色谱技术的高分离效率和高选择性从复杂的混合物中分离制备纯物质的色谱仪器。它与分析型液相色谱仪的差别在于泵流量和柱尺寸大，而且需配置馏分收集器。典型的制备色谱仪所用制备柱尺寸是25mm内径和500mm长，相应的泵流量为50～250ml·min^{-1}，一次进样量可达10～15mg溶质。制备色谱被广泛用于生物医药领域。

制备柱　preparation column　用于从混合物中分离制备纯物质的色谱柱。其柱尺寸比分析型色谱柱大得多，通常内径为10～20cm，柱长为50～100cm。

质荷比　mass-to-charge ratio; *m/z*　离子的质量数（*m*）与所带电荷数（*z*）的比值，用*m/z*表示。当离子所带的电荷数为1时，*m/z*的值就等于离子的质量。

质厚衬度像　mass thickness image　利用样品微区质量厚度的差异造成图像上对应区域光强度的变化所得到的图像。在观察非晶样品时，例如金属或无机材料的表面复型，微小物体或颗粒，生物组织超薄切片或冰冻蚀刻的复型，样品中质量厚度大的区域对入射电子散射强，致使通过物镜光阑孔参与成像的电子减少，相应在荧光屏或底片上形成较暗的区域。它可以显示样品微区的形貌特征，适用于金相组织、断口分析和生物组织的研究。实验时利用小孔物镜光阑，样品经重金属投影或染色，可有效的改善像的衬度。

质粒　plasmid　存在于多数细菌和某些真核生物染色体外的双链、闭环状DNA分子。通常质粒并不是它的宿主细胞所必须的。然而，许多质粒含有在特定环境下所必须具备的基因（如抗生素的抗性基因）。质粒的大小范围从1kb到200kb以上不等。尽管质粒的复制有赖于宿主细胞的复制，但它们也有自身的基因以控制合成时限和每个细胞的质粒拷贝数。质粒在“严紧型控制”下的复制与宿主的复制联系在一起，这种质粒在每个细胞只有一个或几个拷贝，处于“松弛型控制”下的质粒的拷贝数为10～200个。若宿主蛋白合成终止（如用氯霉素处理），这种质粒在每个细胞中的拷贝数能增至数千个。在自然条件下，很多质粒都可以通过一种称为细菌结合的作用转移到新宿主内，形成质粒载体。在医学上和科研中，已广泛应用质粒载体。

质量保证　quality assurance; QA　为使人们确信某一产品、过程或服务质量能满足规定的质量要求所必需的有计划有系统的全部活动。是整个质量管理的一部分。

质量标尺　mass scale　在质谱数据采集过程中要将每个质谱峰位置转换为离子质量，需要有一个质量标尺。这个标尺通常是用参考化合物的已知质量谱峰和它所对应的扫描电压（或磁场强度）建立的关

系曲线。在测定未知化合物质谱时，利用建立的标尺由未知质量峰对应的扫描电压（或磁场强度）进行计算即可得到各个谱峰的离子质量。这一步骤是在数据采集过程中由计算机控制自动完成的。

质量范围 mass range 质谱仪能够测定的原子量或分子量的范围，单位为 Da 或 u。

质量分辨率 *mass resolution* 质谱仪可分辨相邻两质量峰的能力，以 $R=\frac{M}{\Delta M}$来度量。M 为可分辨的两个峰的平均质量，ΔM 为可分辨的两个峰的质量差。实际上，两个离子峰可以有一定重叠。作为判断相邻两个峰是否分开的标准，有定义两峰部分重叠时，峰谷为峰高的 10% 为刚好可以分辨的两个峰；也有定义峰谷为峰高的 50% 为刚好可以分辨的两个峰。因此，使用时应注明按何种定义得出的数值。现在一般用两峰间的峰谷高度为峰高的 10% 时的测定值，用 $R_{10\%}$ 表示。但在实际测量时，很难找到这正好两峰重叠 10% 的峰高，此时用下式计算

$$R_{10\%}=\frac{M}{\Delta M}\times\frac{a}{b}$$

式中，a 为相邻两峰的中心距；b 为峰高 5% 处的峰宽。在有些仪器如傅里叶变换离子回旋共振质谱、飞行时间质谱中，M 为所测得的峰质量，ΔM 为该峰半高宽所对应的质量数。

质量分析离子动能谱 mass analyzed ion kinetic energy spectrum; MIKES 由特定质量的离子生成碎片离子的动能谱。它与指定母离子生成子离子谱对应。在按磁场-电场顺序构成的反配置双聚焦质谱仪中，设定一定的磁场使特定的母离子通过，若在磁场和静电场之间的无场区发生亚稳跃迁，产生碎片离子，再用电场扫描裂解产生的碎片离子。

质量管理 quality management; QM 为确定和达到质量要求所必需的全部职能和活动的管理。它是全部管理职能的一个方面，包括质量政策的制订、所有内部外部产品、过程或服务质量方面的质量保证和质量控制的组织和实施。

质量监督 quality supervision; quality surveillance 根据政府法令或规定，为保证满足质量要求，由用户或第三方对程序、方法、条件、产品、过程和服务进行连续评价，并按规定标准或合同内容对记录进行分析的活动，是质量认证的组成部分，其目的是为了保证产品质量和企业的质量管理体系持续地保持认证时的水平。

质量检验 quality inspection 对产品、过程或服务的一种或多种特性进行测量、检查、试验、计量，并将这些特性与规定的要求进行比较的活动。它与质量控制不同，是一种事后检验，而质量控制是以预防为主，防止产品、过程或服务质量出现问题，是一种事前控制。参见**质量控制**条。

质量控制 quality control; QC 在生产和科学试验中为保持产品、过程

或服务质量满足规定的质量要求所采取的全部有计划有系统的作业技术和活动。如在生产中，用统计方法对产品进行抽样检验，根据抽检产品的特性量值对产品质量及其变化趋势做出科学的分析和判断，及时发现生产过程中出现或潜在的问题，采取改进措施，使生产始终处于统计控制状态，以保证产品质量。在分析测试中，使用标准物质、管理样品、密码样品、空白试验与严格的统计检验，以保证分析测试数据的可靠性和可比性。质量控制是整个质量管理的一部分，其核心是预防为主，防止产品、过程或服务质量出现问题，是一种事前控制。

质量控制图 control chart for quality 简称质控图，又称为质量管理图。根据假设检验的原则构造的用于监控生产过程是否处于统计控制状态的一种以图解方式阐释数据的统计技术。由中心控制线，上、下控制线，有时还有上、下警戒线组成，横坐标为抽样时间或样本序号，纵坐标为欲控制的产品的特性量值。控制中心线（CL）代表所控制产品特性量值的平均值，用实线表示。警戒线和控制线用平行于控制中心线的虚线表示，前者与中心线相距 2 倍标准偏差，后者与中心线相距 3 倍标准偏差。质控图分为计数值与计量值控制图，前者用于质量特性量值是离散变化的计数值，包括不合格品率（p）控制图、不合格品数（pn）控制图、单位缺陷数（u）控制图和缺陷数（c）控制图；后者用于质量特性量值是连续变化的计量值，包括平均值-标准差（$\bar{x}$-S）控制图，平均值-极差（$\bar{x}$-R）控制图、中位值-极差（$\tilde{x}$-R）控制图和单次测定值-移动极差（$\bar{x}$-R_s）控制图。它是统计质量管理的一种简便而有效的手段，主要用于分析和判断生产过程的稳定性；根据产品特性量值的变化趋势，及时发现生产过程的异常现象，预防不合格产品的出现；为评定生产工艺状况和产品质量提供依据。如果抽样检验的产品特性量值落在警戒线和控制线之间，表示生产过程存在异常变化的征兆，应查明原因，采取措施预防不合格产品出现。如果抽样检验的产品特性量值落在控制线内，且在中心线两侧随机出现，说明生产过程处于统计控制状态，生产情况正常。否则，表示生产过程出现了异常情况，应查明原因，采取措施预防不合格产品出现。

质量控制样 quality control sample 又称为管理样。为确定分析测量中的不确定度、用于日常例行分析质量控制与管理而专门制备的样品。参见**管理样**条。

质量流量 mass flow rate 单位时间内通过某截面的流体的质量。如果流动是稳定的，则质量流量不随时间而变化，在气相色谱中，质量流量大多用 $g \cdot s^{-1}$ 和 $mol \cdot s^{-1}$ 表示。当用流动法配制标准气体样品时，标准样的计量常用质量流量表示。质量流量用 G 表示。

$$G = \omega \cdot F \cdot r$$

式中，ω 为平均速度（$m \cdot s^{-1}$）；F 为截

面积(m^2);r 为流体的密度($g \cdot m^{-3}$)。

质量色谱 mass chromatography 在色谱-质谱分析过程中,以一定的时间间隔将“质谱”记忆在计算机中后,取出特定质量数的离子强度加以记录,得到色谱图的方法。

质量色谱图 mass chromatogram 又叫提取离子色谱图(extract ion chromatogram)。是质谱法处理数据的一种方式。在 GC-MS 或 LC-MS 中,选定一定的质量扫描范围,按一定的时间间隔测定质谱数据并将其保存在计算机中,然后可以用各种办法调出质谱数据。如果要观察特定质量与时间的关系,可以指定这个质量,计算机将以指定离子的强度为纵坐标,以时间作为横坐标,表示质量与时间的关系。这种方法叫做质量色谱法。得到的图叫做质量色谱图或提取离子色谱图。

质量数 mass number 又称为整数质量(Nominal mass)。是用组成原子核的质子和中子数之和计算出的质量,如,$^{12}C = 12$、$^{1}H = 1$,$^{16}O = 16$,$^{14}N = 14$,$^{1}H\,^{35}Cl = 36$、$^{1}H\,^{37}Cl = 38$ 等。

质量衰减系数 mass attenuation coefficient 1g 物质对指定波长 X 射线强度的衰减能力。透射 X 射线强度的减弱是物质对辐射的散射和吸收的结果,所以衰减系数相应地就等于散射系数和吸收系数之和。但一般情况下,散射系数比吸收系数小得多,可以忽略不计,因此衰减系数往往近似地等于吸收系数。

质量吸收系数 mass absorption coefficient 1g 物质对指定波长 X 射线的吸收能力。质量吸收系数 μ_m 与线性吸收系数 μ 的关系为 $\mu_m = \frac{\mu}{\rho}$,其中 ρ 为该物质的密度。质量吸系数 μ_m 是化学元素的一种原子属性,与入射 X 射线的波长 λ,以及元素的原子序数 Z 有关:$\mu_m = k\lambda^3 Z^3$,式中 k 为常数。

质量型检测器 mass detector 又称质量流量敏感型检测器。检测器给出的信号与单位时间内进入检测器的组分量成比例,与流动相流速及组分在流动相中的浓度无关,因此峰面积不随流动相流速而变。如氢火焰离子化检测器,其灵敏度高、死体积小、响应快,适合连接各种型号的毛细管柱。其灵敏度的表示方式为单位时间内单位物质量通过检测器所产生的信号,如 $mV \cdot g^{-1} \cdot s^{-1}$,或 $A \cdot g^{-1} \cdot s^{-1}$。

质量(换算)因数 mass factor 沉淀重量法中,称量物质(w)的摩尔质量(M_w)与待测组分(x)的摩尔质量(M_x)之间的质量比。其定义为

$$质量因数 f = \frac{M_x}{M_w} \times \frac{a}{b}$$

式中,a 和 b 是为保持分子和分母中待测组分原子数目相等的整数。例如,以 Fe_2O_3 为称量形式测定某试样中 Fe 含量,则其质量因素

$$f = \frac{2M_{Fe}}{M_{Fe_2O_3}} = 0.6994$$

质谱法 mass spectrometry;MS 亦称质谱学(mass spectroscopy)。采用不同离子化方式,将待测物电离形成带电离子,然后按质荷比 m/z 值分离、检测的方法。质谱法是实现原子(分子)

质量测定、同位素分离、有机物结构鉴定以及气相离子化学基础研究的谱学方法之一。作为一种检测手段，其灵敏度高，定性的专一性强，定量再现性好，能够给出被分析物质的质量数及丰富的结构信息。

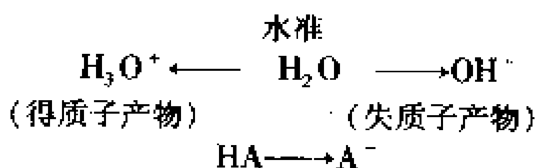
质谱图 mass spectrum 质谱测定结果经计算机处理后，以棒状图（或数据列表形式）表示的谱图。它是二维图谱，横坐标表示离子的质荷比（m/z），对于单电荷的离子，电荷数 $z=1$，横坐标表示的数值即为离子的质量；纵坐标表示离子流的强度，通常用相对强度来表示，即把最强的离子峰的强度定为100%，其他离子强度以其百分数表示。有时也以所有被记录离子峰的总强度作为100%，各离子以其所占的百分数来表示。质谱图中的各质量离子峰代表被测物质的属性，可作为定性、定量分析的依据。

质谱仪 mass spectrometer 一种现代分析仪器。它利用带电粒子在电场或磁场中运动轨迹的差异，将不同质荷比（m/z）的离子分开，进行检测和记录。质谱仪的主要组成有离子源、质量分析器、检测器、进样系统、真空系统、数据处理系统和电子控制系统。过去习惯上将用电流进行检测和记录的质谱仪器叫做质谱计（mass spectrometer），将利用感光板检测记录离子的质谱仪器称为质谱仪（mass spectrograph），现在已不再细分，都称为质谱仪。质谱仪品种繁多，按用途分类可分为有机质谱仪、无机质谱仪和同位素质谱仪；按质量分析器分类可分为扇形场质谱仪、四极杆质谱仪、飞行时间质谱仪、离子回旋共振质谱仪、离子阱质谱仪等；按离子源类别分可分为火花源质谱仪、电感耦合等离子体质谱仪、二次离子质谱仪等。

质谱-质谱法 mass spectrometry/mass spectrometry; MS/MS 亦称串联质谱法。参见**串联质谱法**条。

质子泵 proton pump 活跃的质子跨膜转运机理，如线粒体内膜质子泵、胃壁细胞质子泵和类囊体膜质子泵等。

质子参考水准 proton reference level 亦称零水准（zero level）。在利用参考水准法书写质子守衡式（参见**质子守衡式**条）时，必须选择适当的物质作参考，以它们作为水准来考虑质子的得失，即利用水准的质子守恒代表整个溶液的质子守恒。通常选择溶液中大量存在并参与质子转移的物质作水准。例如，为书写一元弱酸HA水溶液的质子守衡式时，常选 H_2O 和HA作水准，书写质子守衡式，即



质子守衡式(PBE)为

$$[H_3O^+]=[OH^-]+[A^-]$$

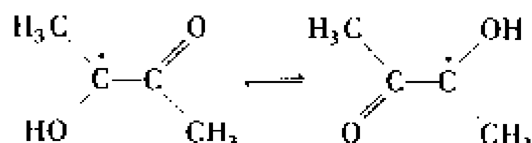
质子惰性溶剂 proton inert solvents 按酸碱质子理论分类，指那些没有显著质子自递倾向的溶剂，如苯、丙酮、乙腈、正己烷、硝基苯、四氯化碳及氯仿等，在非水滴定中，用作弱酸、弱碱或混合酸、碱分别滴定时的

溶剂。

质子化分子 multiply protonated molecule 分子M与一个或多个质子H^+加合生成的离子，用「$M+nH$」$^{n+}$表示。

质子激发X射线荧光分析 proton induced X-ray emission analysis; PIXE 利用原子受质子激发后产生的特征X射线的能量和强度来进行物质定性和定量分析的方法，是带电粒子激发X射线荧光分析中应用最多的一种。它是1970年由乔汉逊（J. B. Johansson）等提出并迅速发展起来的一种高灵敏的痕量元素分析技术。当样品受到由加速器产生的高速质子束辐照后，质子与样品中的原子发生库仑散射，质子按一定的几率从原子内层驱逐出一个电子，留下空穴，位于较高能级的电子随即自发跃入内层空穴，产生X射线荧光。质子束对准位于其焦面上的样品表面，沿x和y轴扫描，束斑到达和停留在某一位置时Si(Li)探测器记录该点的X射线全谱，根据其能量和强度进行定性和定量分析。在实际分析工作中，多采用相对测定法，以内标法应用最多。本法的优点是：灵敏度高，绝对灵敏度可达10^{-16}g，相对灵敏度可达$10^{-6}\sim10^{-7}$ $g\cdot g^{-1}$；可分析的元素范围广，可分析原子序数大于13的各种元素；取样量少，通常为10^{-9}g；不破坏性样品；准确、迅速；能进行多元素同时测定。如果将质子束聚焦成直径为几微米的细束，并对样品逐点进行扫描测量，可以达到有空间分辨的元素含量分布图。该方法广泛地应用于生命科学、环境科学、考古学、材料科学和刑事物证鉴定等领域。

质子交换 proton exchange 质子交换就是质子可以在分子的不同位置中变换。自旋体系中发生的质子交换对ESR谱有很大影响。例如二乙酰基半双酮阳离子自由基具有下列变换：



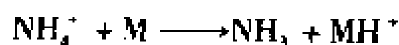
这个离子基的ESR谱依赖于pH值。当在强碱介质中，它有7条峰，它们是两个甲基中的等性质子贡献的。但当pH = 1 ~ 2时，就出现4条峰，并伴有线宽交替现象。出现这些现象的原因就是上式的质子交换。

质子守衡式 proton balance equation; PBE 亦称质子条件式（proton condition equation）。根据酸碱质子理论，酸碱反应的实质是质子的转移。酸碱反应达到平衡时，酸给出的质子数和碱得到的质子数必须相等，这种质子守恒关系的数学表达式，称为质子守衡式。利用质子守衡式可以方便地表征出溶液中的溶剂化质子的平衡浓度与其他酸碱型体平衡浓度之间的关系。可以采用多种方法书写质子守衡式，最常采用零水准法（参见**质子参考水准**条）。

质子探针微束分析 particle-induced X-ray emission micro-analysis 非破坏性的微区分析。能量为3MeV的质子束在石英中的穿透深度可达83μm。由质子束对微区样品激发后，

探测 X 射线与 γ 射线，可测定轻重元素的含量。其中扫描质子探针可对样品作 $x-y$ 二维步进扫描，也可进行三维分析。由于质子的质量约为电子的 1800 倍，原子激发过程中产生的轫致辐射比电子激发低得多，故质子探针的检测限优于电子探针 2～3 个数量级。质子在物质中的散射程度小，对于较厚的样品具有良好的空间分辨率。加速到几个 MeV 的质子束在一般岩石样品中的行程可达到几十微米，而电子探针只有 1～2μm，因此质子探针微分析更能反映样品内部的元素信息。现在质子探针最小可聚焦到 0.4μm，但一般采用的焦斑约为 10μm。该项技术已应用于环境、地学和冶金等领域的分析。

质子转移反应 proton-transfer reaction 质谱分析中化学电离中的一种反应。质子化的反应气离子（例如 NH_4^+）与样品分子 M 在化学离子源中碰撞，当样品分子 M 的质子亲和力大于反应气离子的质子亲和力时，会发生质子转移反应



$$NH_4^+ + M \longrightarrow NH_3 + MH^+$$

结果得到 M_r+1 的质谱峰。

质子自递常数 autoprotolysis constant 同种两性物质分子之间质子自递反应的平衡常数。例如，水分子间：$H_2O + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$，$K = a_{H_3O^+} \times a_{OH^-} \approx [H_3O^+][OH^-]$

此时的 K 称为水的质子自递常数 K_s，又称水的活度（离子）积 K_w，25℃时，$K_w = 1.00 \times 10^{-14}$。同理，乙醇的质子自递常数 $K =$



$a_{C_2H_5OH_2^+} \times a_{C_2H_5O^-}$。

致癌试验 carcinogenicity test 当某种化学物质经短期筛选试验证明具有潜在致癌性，或其化学结构与某种已知致癌剂十分相近，而此化学物质有一定实际应用价值时，就需用致癌性试验进一步验证。致癌试验通常是将受试化学物质以一定方式处理动物，在该动物的大部分或整个生命期间及死后检查肿瘤出现的数量、类型、发生部位及发生时间，与对照动物相比以阐明此化学物质有无致癌性。

致癌物 carcinogens 能在人类或哺乳动物的体内诱发癌症的物质。确定一种物质是否具有致癌作用，主要通过动物实验和人群流行病学调查。致癌物根据性质可分为化学性致癌物（如苯并［a］芘、2-萘胺等）、物理性致癌物（如射线、放射性核素氡等）和生物性致癌物（如某些致癌病毒）。据估计，人类的肿瘤 80%～85% 与化学致癌物有关。

致癌作用 carcinogenesis 环境中致癌物诱发肿瘤的作用。肿瘤有良性恶性之分，恶性肿瘤又称为癌。在致癌作用概念中的“癌”，包括良性肿瘤和恶性肿瘤。肿瘤诊断的可靠依据是病理组织学的检查。致癌作用的过程相当复杂。化学物质的致癌作用一般认为有两个阶段：第一是引发阶段，即在致癌物作用下，引发细胞基因突变；第二是促长阶段，主要是突变细胞改变了遗传信息的表达，致使突变细胞和癌变细胞增殖成为肿瘤。

致畸试验 teratogenicity test 对能在胚胎发育期间引起胚胎永久性结构和功能异常的化学物质进行的试验。其原理是，在胚胎发育的器官形成期给妊娠动物染毒，在胚胎出生前将妊娠动物处死，取出胎仔检查其骨骼和内脏畸形变化的情况。

致畸作用 teratogenesis 人或动物在胚胎发育过程中由于各种原因所形成的形态结构异常，称为先天性畸形或畸胎。遗传因素、化学因素、物理因素（如电离辐射等）、生物因素、母体营养缺乏或内分泌障碍等都可能引发先天畸形。环境污染通过人或动物母体影响胚胎发育和器官分化，使子代出现先天畸形的作用，称为致畸作用。

致敏剂量 priming dose 为了刺激动物免疫应答而给予动物的抗原剂量。

致死剂量 lethal dose; LD 足以杀死某种生物或细胞的辐射剂量。它随生物和细胞的种类及其他条件而变化。在放射生物学和放射医学上常用50%的致死剂量LD_{50}和90%致死剂量LD_{90}，表示引起某种生物或细胞50%或90%死亡的辐射剂量。同样的致死剂量引起致死的时间也不同，为区别致死时间，在致死剂量的后面再加一个下标，如$LD_{50/30}$，表示30日内引起50%死亡的辐射剂量。

致突变作用 mutagenesis 污染物或其他环境因素引起生物体细胞遗传信息发生突然改变的作用。这种变化的遗传信息或遗传物质在细胞分裂繁殖过程中能够遗传给子代细胞，使其具有新的遗传特性。具有这种致突变作用的物质，称为致突变物（或称诱变剂）。

秩和检验 rank test 一种非参数检验方法。使用这种检验方法，对样本是否来自正态总体没有严格规定。每个测量值在一组按数值大小排列的测量值中的序次，称为该测量值的秩，若两个测量值相等，其秩等于两测量值秩的平均值，各测量值的秩的总和称为秩和。如果将x_1，x_2，…，x_n和y_1，y_2，…，y_n两组测量值来自相同的总体，在两组测量值混合排序中，y和x出现在第i个序次的概率是相同的。计算测量值数目较少的一组测量值的秩和T，若T小于秩和检验表中约定显著性水平时的下限值T_1或大于上限值T_2，则认为两组测量值之间有系统误差。

当n_1、n_2较大时，秩和T近似遵从均值为$\overline{T}$与标准偏差为S_T的正态分布

$$\overline{T}=\frac{n_1(n_1+n_2+1)}{2}$$

$$S_T=\sqrt{\frac{n_1n_2(n_1+n_2+1)}{12}}$$

式中，n_1与n_2分别是两组测量值的数目。因此，可利用正态分布特性来检验两组测量值之间是否有显著性差异，所用的统计量是

$$t=\frac{T-\overline{T}}{S_T}$$

在约定显著性水平$\alpha=0.05$时，t落在[-1.96, 1.96]区间的概率为

0.954，而落在它外面的几率小于5%。若由试验数据计算的 t 落在该区间之外，则在95%的置信水平判定两组测量值之间有显著性差异，即存在系统误差。

智能色谱 chromatography with artificial intelligence 利用计算机技术将智能化的色谱软件与先进的硬件技术结合，使分析过程（色谱条件的选择和定性定量分析）实现全自动控制的色谱分析技术。

置换滴定法 replacement titration 广义的置换滴定法，是指将欲测定的物质通过一置换反应，置换出另一种可用于滴定的物质进行滴定，根据置换出的物质的量计算欲测定的物质的量。例如，欲用配位滴定法测定某试样溶液中 Ag^+，但 Ag^+ 与EDTA形成的配合物不够稳定，不能用EDTA直接滴定 Ag^+。此时可在含 Ag^+ 试液中加入过量 $Ni(CN)_4^{2-}$，由于发生下式置换反应：$2Ag^+ + Ni(CN)_4^{2-} \rightleftharpoons 2Ag(CN)_2^- + Ni^{2+}$ 然后在pH=10的氨性缓冲溶液中，以紫脲酸胺为指示剂，用EDTA滴定置换出的 Ni^{2+}，即可求得试液中 Ag^+ 的含量。

置换色谱法 replacement chromatography 亦称排代色谱法或置换层析法。一种用于大量样品分离的非线性制备色谱分离方法。在普通色谱法中，当注入样品量超过柱容量的1%时，色谱峰分辨率下降，致使分离效率差。在置换色谱中，加入大量样品使柱前端饱和。再用另一种与固定相作用力比样品中某组分与固定相作用力强的组分（称为置换剂）将该组分置换出色谱柱，而其余组分因置换能力相对较弱而被保留，从而达到高效、高产率、高柱容量的分离。近年来置换色谱法广泛用于生化物质如氨基酸、蛋白质等的分离与纯化及石油产品族分离，如烷烃、烯烃、芳烃的分离。例如，以苯基三丁基铵为置换剂可通过离子交换色谱法制备分离高纯度组氨酸和精氨酸。

置信度 degree of confidence 在进行统计假设检验时，做出的统计判断所具有的可信程度。在分析测试中，通常取置信度为95%。

置信概率 confidence probability 用来表征统计推断可信程度的概率。测量值是以概率取值的随机变量，具有波动性，由样本值去估计总体的参数时，不可能是100%可靠，但可以一定的置信概率肯定被估参数被包含在某一范围内。

置信区间 confidence interval 亦称置信范围。是在一定的置信概率水平，由上、下两个置信限定出的区间。它表示被估参数真值在一定概率 p 下被包含在内的区间。置信区间具有统计的含义，指从总体中抽取一大批容量相同的样本，并就每个样本求得真值的置信区间，这时大约有 p 个置信区间包含真值。对于一个特定的置信区间，要么包含真值，概率为1；要么不包含真值，概率为0，而不能说真值落在该置信区间的概率为 p。

置信系数 confidence coefficient 在一定概率下限定被估参数不确定度的系数。置信系数越大，置信区间越宽，统计判断失误的机会越小，但被估参数的不确定度变大；置信系数越小，置信区间越窄，统计判断失误的可能性增大，但被估参数的不确定度变小了。置信系数取多大合适，需根据实际工作要求而定。在分析测试工作中，如果不加特殊说明，通常选用置信概率为0.95所相应的置信系数。

置信限 confidence limit 利用统计量由样本值推断总体参数时，在真值估计量的两侧所限定的界限。测量值是一个以概率取值的随机变量，在有限次测量中，不可能得到真值，而只能得到真值的近似估计值与从统计上推断置信区间包含真值的概率是多少，为此需选定一个置信概率 p，并在该置信概率 p 下在估计值的两侧各定出一个界限。若对真值为 μ 的样品进行 n 次重复测量得到的平均值为 $\bar{x}$，平均值的标准偏差为 $S_{\bar{x}}$，则真值 μ 落在以平均值 $\bar{x}$ 为中心、置信限为 $\pm S_{\bar{x}}t_{\alpha,f}$ 所确定的区间内，式中 $t_{\alpha,f}$ 是置信度为 $p=1-\alpha$、自由度为 $f=n-1$ 的置信系数，α 是显著性水平。

中红外分束器 middle infrared beamsplitter 分束器是用来分裂光束使之产生干涉的重要部件。其组成为一个半透膜，能让光透过一半，反射一半。目前，还未找到一种半透膜在红外光的各波段（近红外、中红外、远红外）都具有半透性质。因此，在不同的红外谱区需选用不同材料的膜，中红外分束器采用的是镀锗膜。这种膜一般很薄，厚度仅有几十纳米，镀在能透红外的特殊材料上。由于被镀的衬板会使光路不平衡，需另加一块同样材料的补偿板。分束器不好或镀膜有缺陷，并会在 $4000cm^{-1}$ 左右的本底能量图上观察到凹陷现象。

中红外光谱学 middle infrared spectroscopy 研究红外辐射在中红外区（$2.5\sim25\mu m$ 或 $4000\sim400cm^{-1}$）与分子振动或转动的相互作用。基频振动是红外活性振动中吸收最强的振动，大多数有机化合物和无机离子的基频吸收都落在中红外区内。中红外光谱是红外光谱中应用最早和最广泛的，积累的资料也最多，仪器亦最为成熟，最适于进行红外光谱的定性和定量分析。

中红外光源 middle infrared source 在中红外区（$4000\sim400cm^{-1}$）常采用炽热镍铬丝灯、金属陶瓷灯、硅碳棒作为光源。中红外光源通常采用水冷和空冷两种方式，水冷效果较好，能量高，且稳定。近年也有厂家研制大功率空冷光源，来提高光源能量。在中红外测量中，小型仪器多采用风冷热镍铬丝灯。大型仪器常使用大功率的水冷硅碳棒灯。

中红外检测器 middle infrared detector 对检测器要求响应速度快，灵敏度高，测量波段宽。到目前为止，还没有一个检测器能覆盖红外光谱的全波段，一般仅能检测一定范围。常用的中红外检测器有热电型、光电导

型、半导体 P-N 结型以及电阻量热计型等。使用最广的是热电型和光电导型两种。热电型检测器的波长特性曲线平坦，对各种频率响应几乎一样。在室温下即可使用，价钱便宜，如 TGS（硫酸三甘酞）检测器。它的缺点是响应速度较慢，灵敏度较低，调制频率高时信号减弱。光电导型检测器具有较高的灵敏度，一般比热电型高 10 倍左右。它的响应速度快，适于高速测量。但它需液氮冷却，如 MCT 检测器，在低于 $650cm^{-1}$ 的低频区，灵敏度下降。

中红外区 middle infrared region 早期将波长为 2.5 ~ 16.5μm 的光区列为中红外区，此波段为氯化钠棱镜透过红外线的区域，所以又称为岩盐区。但随着光栅仪器以及傅里叶变换红外仪器的发展，目前将 2.5 ~ 25μm（4000 ~ $400cm^{-1}$）视作中红外区。此波段是有机化合物产生红外吸收的重要区域。

中间光阑 middle diaphragm 中间光阑是一般光谱仪三透镜照明系统经常采用的光阑，装置于中间透镜的前面。这种光阑由可绕轴转动的圆屏制成，沿着圆屏的径向方向开有 7 个孔。其中 6 个为矩形孔，其高度分别为 0.5、0.8、1.2、2、3.2、5mm。另外一个为圆形孔，其直径与中间透镜相同。通过光源位置的调节，可使观测区所发出的光通过光阑，而非观测区的所发出的光被圆屏遮挡。此外，可以随意转动圆屏使所需的某一光阑进入光路，以改变进入光谱仪的光强，适应不同分析任务的需要。

中间镜 middle lens 电子透镜中将来自物镜的电子像放大、投射到观察屏上的装置。它和物镜相似，但焦距太长。除了有放大镜的作用外，还起衍射镜的作用。通过减弱中间镜电流，增大其物距，使其物平面与物镜的后焦面相重，即可把物镜后焦面上所形成的电子衍射花样投射到中间镜的像平面，即投射镜的物平面上，经投影镜放大而在观察屏上显示出放大的电子衍射花样。

中阶梯光栅 echelle grating 是一种高分辨阶梯形衍射光栅，用于紫外-可见区高分辨光谱分析工作。中阶梯光栅采用 8 ~ 300 线 · mm^{-1} 的低线槽密度、60° ~ 70° 的大入射角，工作衍射级次在 $m = 100$ 左右甚至更高，因而可获得 10^6 以上的光谱分辨率；中阶梯光栅角色散率大、可配短焦距物镜，因而仪器结构紧凑，而且工作光谱范围内效率较高。中阶梯光栅的最大缺点是自由光谱区极小，每一级光谱受上一级和下一级光谱重叠干扰，只有几个纳米的范围。因此，采用中阶梯光栅的仪器必须有交叉色散系统（例如加用一块垂直方向色散的棱镜），在二维方向将每级光谱分离。此外，中阶梯光栅制造极困难，工作短槽面平面度精度误差应小于 1/20 波长，光洁度极高，栅线间距误差极小，因此价格昂贵。

中阶梯光栅光谱仪 echelle grating spectrometer 用中阶梯光栅做色散元件的光谱仪器。具有色散率高、紧

凑、造价低等优点。

中空纤维抑制器 hollow fiber suppressor 用纤维膜制成中空纤维管，柱流出物从管内流动，再生剂（抑制剂）溶液从管外流动，抑制反应是通过离子交换纤维膜进行。纤维膜的材料通常是聚苯乙烯。该抑制器的死体积很小。

中位值 median 在一组依序排列的数目为奇数的测量值中居于中间位置的测量值，在一组依序排列的数目为偶数的测量值中，它是居于中间位置的两测量值的算术平均值。在数据对称分布的情况下，算术平均值 $\bar{x}$ 等于中位值 $\tilde{x}$。在数据呈偏态分布时，二者不相等，数据分布右偏时，$\tilde{x}<\bar{x}$；数据分布左偏时，$\bar{x}<\tilde{x}$。与算术平均值相比，它不受极值的影响，是一个稳健统计量。

中心法则 central dogma 关于DNA、RNA和蛋白质三者间关系的一种假说。该假说认为遗传信息流的方向是：DNA→RNA→蛋白质。1970年发现逆向转录现象，证明RNA也可以作为模板合成DNA，从而丰富了中心法则的内容。

中性火焰 neutral flame 即化学计量火焰。是一种燃气和助燃气的组成符合它们反应化学计量关系的火焰。特点是温度高、背景低和噪声小。

中性粒细胞 neutrophil 它占白细胞总数的50%～70%。在胞浆中含中性颗粒，核形一般有2～4叶，以三叶者居多。它是血中主要吞噬细胞，在防止急性感染中起主要作用。正常情况下寿命为4～5d，部分颗粒细胞随外分泌丧失，细胞死亡后被巨噬细胞吞噬。

中性粒细胞 NBT 实验 nitroblue tetrazolium day test for neutrophil 中性粒细胞在吞噬杀菌过程中，细胞内氧和能量消耗增加，磷酸己糖旁路代谢活跃，可使无色的硝基蓝四氮唑（NBT）还原为蓝色甲替，阳性颗粒定位于胞浆中。正常人血涂片小于10%，细菌感染时增高。

中性磷酸酯萃取 neutral phosphate extraction 利用含 $-\overset{|}{\underset{|}{P}}=O$ 官能团的萃取剂实现金属离子萃取的方法。其特点是：被萃取物在萃取过程中与以中性分子形式存在的萃取剂结合，生成中性络合物而进入有机相。其中磷酸三丁酯（TBP）是一种重要的中性磷酸酯类萃取剂。

中性碎片丢失扫描 neutral fragment loss scanning 串联质谱法中的一种扫描方式。用于检测丢失特定质量中性碎片的离子。它可以快速寻找具有特定官能团的一类化合物。

中性洗涤纤维测定 determination of neutral detergent fiber 样品经中性洗涤剂浸煮后，残渣用热蒸馏水充分洗涤，然后加入α-淀粉酶溶液分解结合态的淀粉，再用蒸馏水、丙酮洗涤，所得残渣烘干后即为中性洗涤纤维，包括纤维素、半纤维素、木质素、角质等的总含量。试样中的无机物含量可经灰化后扣除。此法是美国谷物化

学家协会（AACC）推荐测定中性洗涤纤维方法，适用于谷物及制品、饲料、果蔬等样品，对蛋白质、淀粉含量高的样品误差较大，也不能用于测定水溶性非消化性多糖。

中压液相色谱 middle-pressure liquid chromatography 操作压力介于高压和低压液相色谱之间（如2～3MPa）的液相色谱法。主要用于实验室和工业规模的生物样品制备。

中子活化分析 neutron activation analysis；NAA 采用中子流辐照样品中稳定核转换为放射性核素的活化分析方法。1936年由诺贝尔奖获得者赫维西（C. C. de Hevesy）等提出，是一种高灵敏的绝对分析方法。当用中子流照射靶元素时，引起核反应，产生放射性核素的放射性活度与试样中靶元素的质量成正比。中子不带电，质量大，对靶子能有效地穿透和传递能量，$E \approx 0.25eV$ 的热中子反应几乎都是（n，γ），反应截面 σ 一般都比较大，且很少有副反应，因此，热中子活化分析，特别是反应堆热中子活化分析，供给的中子流量大，灵敏度高，是测定痕量元素的有效手段。中子活化分析虽是一种绝对分析方法，但由于放射性绝对测量比较困难，通常采用相对测量法。它在各种活化分析方法中应用最广，优点是灵敏度高、精密度和准确度好、基体效应小、超微量取样、非破坏性、能进行多元素同时测定。参见**活化分析**条。

中子源 neutron source 产生中子的设备或装置。广义的中子源包括反应堆中子源、加速器中子源和放射性同位素中子源（例如^{252}Cf）。后者的特点是中子强度低，一般小于每秒10^{10}中子，体积小、可移动，价格低廉，使用方便。（α，n）中子源是放射性同位素中子源中应用最广的一种。中子源主要用于石油和天然气探测、活化分析、癌症治疗、土壤和物料中水分测定等。

终止密码子 termination codon; stop codon mRNA 分子中作为翻译多肽链终止信号的三联体密码子，通常用矿石或宝石的名称命名，包括琥珀（amber）密码子UAG、赭石（ochre）密码子UAA和欧珀（opal）密码子UGA。研究表明，UAA、UGA和UAG这3个终止密码在不同种真核mRNA中使用频率不同。在脊椎动物和单子叶植物中，UGA的使用频率最高，而其他的真核生物中最主要的终止密码为UAA；UAG则使用频率最低。终止密码的选用在很大程度上受mRNA中GC含量的影响。对不同种类真核mRNA终止密码两侧核苷酸序列分析显示，紧接终止密码3′端的核苷酸分布有倾向性。其嘌呤核苷酸（A＋G）出现频率在60%～70%之间，而C的出现频率小于17%。原核mRNA该位的核苷酸以U的频率最高。推测该位核苷酸可能与终止作用的调节有关。编码赖氨酸的AAG密码经常出现于终止密码5′端位置，因此赖氨酸为真核mRNA翻译产物羧基端常见的氨基酸。

肿瘤坏死因子 tumor necrosis fac-

tor; TNF 存在于血清中的抗肿瘤因子之一。由巨噬细胞或B淋巴细胞产生。含有唾液酸和半糖胺。体外试验能直接引起某些肿瘤细胞株裂解，而对另一些肿瘤细胞则有抗增殖作用，还可引起肿瘤坏死和缩小。目前已能应用重组DNA技术利用大肠杆菌产生肿瘤坏死因子，在肿瘤治疗中可望成为有力的新武器。

肿瘤特异性抗原 tumor specific antigen 细胞表面的组织相容性抗原。为肿瘤细胞所特有，正常组织细胞并不存在，与其他肿瘤不发生交叉反应。目前次抗原尚未获得，有相同的肿瘤特异性抗原，可能是病毒的遗传物质掺入宿主细胞的染色体内而形成。

仲裁法 referee method 在一种商品有若干可供选择的检验方法时，可能发生争议的各方事先约定或按照某一公认的规则指定一种方法。它作为发生争议时采用的惟一检验方法。

仲裁分析 arbitration analysis 不同单位对分析结果有争议时，请权威单位进行裁判的分析工作，称为仲裁分析。

众数 mode 被研究的数据总体中出现次数最多的测量值，以符号 M_0 表示。例如，统计学生的考试成绩，成绩为80分的学生人数最多，则学生考试成绩的众数 $M_0=80$。在等距分组统计数据时，众数所在的数组，称为众数组，有时出现一个以上的众数组。当数据分布对称的情况下，众数 M_0 就是众数组的组中值。当各组内数据分布频数不相同时，众数 M_0 不等于众数组的组中值，而要根据与众数组前后相邻两组内的数据频数 f_1 与 f_3，用众数组的上限值 x_U 和下限值 x_L 来计算众数 M_0，其计算公式分别是

$$M_0 = x_U - \frac{f_2 - f_3}{(f_2 - f_1) + (f_2 - f_3)} x_i$$

$$M_0 = x_L + \frac{f_2 - f_1}{(f_2 - f_1) + (f_2 - f_3)} x_i$$

式中，f_2 是众数组的频数；x_i 是组距值。在数据对称分布的情况下，算术平均值 $\bar{x}$、中位值 $\tilde{x}$ 与众数 M_0 三者完全相等。在数据呈偏态分布时，三者不相等，数据分布右偏时，$M_0 < \tilde{x} < \bar{x}$；数据分布左偏时，$\bar{x} < \tilde{x} < M_0$。根据英国统计学家皮尔逊（K. Pearson）经验，在数据分布偏斜程度不是很显著时，三者的关系是：$M_0 = 3\tilde{x} - 2\bar{x}$。众数最常用来表示离散型随机变量分布的集中位置，也可用来表示连续型随机变量分布的集中位置。

重金属染色法 dye by heavy metal 在用透射电镜分析生物样品时，由于普通生物样品的元素基本相似，样品的衬度很低，很难进行观察。为了增加生物样品的衬度，一般可以采用重金属盐处理生物样品，使生物样品中的某些部分和重金属结合，从而增加电镜图像反差的方法。

重均分子量 weight mean molecular weight; M_w 在液相色谱法（凝胶色谱法）中是指对高分子聚合物中不同

分子量进行个数和质量加权平均后得到的聚合物分子量的表征值。如由10个分子量为100和5个分子量为1000的混合物的重均分子量为

$$\frac{(10\times100)100+(5\times1000)1000}{(10\times100)+(5\times1000)}=850$$

重量分析 gravimetric analysis 用适当的方法将被测组分与试样中的其他组分分离后，转化为一定的称量形式，然后称重，由称得的物质的质量计算被测组分含量的分析方法。根据被测组分与试样中其他组分分离方法的不同，可分为沉淀重量法、气化法（又称挥发法）、电解法和提取法。沉淀重量法为主，该法是将被测组分以难（微）溶化合物的形式沉淀出来，经过滤、洗涤、烘干或灼烧后，称重计算其含量；气化法是通过加热或其他方法使试样中的被测组分挥发逸出，根据试样质量的减少计算该组分的含量，或者利用适当的吸收剂吸收逸出的被测组分，根据吸收剂质量的增加计算该组分的含量；电解法是利用电解原理，使金属离子在电极上还原析出，根据电极质量的增加计算该组分的含量。提取法是用有机溶剂将被测组分从试样中提取出来，根据试样质量的减少计算该组分的含量，或通过加热除去提取液中的有机溶剂后直接称量被测组分计算分析结果。重量分析直接用分析天平称量获得分析结果，不需要与标准试样或基准物质进行比较，是常量分析中准确度最高，精密度最好的分析方法之一。缺点是操作麻烦，耗时多，目前应用和文献报道已大为减少，但常量硅、硫、镍及某些稀土元素的精确测定，仍多采用沉淀重量法。

重原子猝灭 heavy atom quenching 含溴或碘等重原子的化合物，由于重原子效应，增加了自旋-轨道耦合作用，增大了激发态分子的$S_1\rightarrow T_1$系间窜跃的效率，使得荧光的量子产率减小，磷光量子产率增大。在含重原子的溶剂中也会产生重原子效应，使荧光量子产率减小。这种由重原子引起的荧光量子产率降低的现象称为重原子猝灭。

重原子法 heavy atom method 晶体结构测定中破解相角问题的一种帕特逊方法。当晶胞的一个不对称单位中只含有一个或少数几个重原子，其余均为轻原子时，由于重原子之间的向量峰数目少，明显突出，容易辨认，配合空间群和等效点系数据，一般不难根据它们的向量分布情况，定出重原子的坐标参数，在此基础上可用差值傅里叶合成等方法确定其他轻原子的坐标。这种先测定重原子坐标参数的方法被称为重原子法。

重原子效应 heavy atom effect 磷光测定体系中有原子序数较大的原子存在时（待测分子内或加入的含有重原子的试剂），由于重原子的高核电荷引起或增强了溶质分子的自旋-轨道耦合作用，从而增大了$S_0\rightarrow T_1$吸收跃迁和$S_1\rightarrow T_1$体系间窜跃的几率，即增加了T_1态粒子的布居数，有利于磷光的产生和增大磷光的量子产率，这种作用称为重原子效应。重原子效应

一般使荧光猝灭，磷光寿命缩短，因此重原子效应是增强磷光信号的重要手段。

轴峰 axial peak 出现在 F_2 轴（$\omega_1=0$）上的峰。它是演化期未受调制而在检测期成为可观测的横向磁化分量。轴峰往往信号很强，尾部又长，会淹盖谱中许多有用的小信号，因此应设法抑制掉。

轴向扩散 longitudinal diffusion 又称纵向扩散。参见**纵向扩散**条。

轴向吸收池 absorption pool of axial direction 光束从毛细管的一端入射，通过沿毛细管轴向传播来增加分析光程。经球镜聚焦的光束从毛细管一端（低压端）入射，在另一端（高压端）出射，用大芯径和高数值孔径光纤收集透射光。在任一给定时间，总吸收是柱内各成分吸收的总和。柱中每流出一个吸收组分，透射比就跃增一次。

轴向压缩柱 axial compression column 又称纵向压缩柱。是一种可在柱轴向加压的制备型色谱柱。其内径约 8cm，上端是柱盖，下方有一个可移动的活塞。先将填料从上端装入柱内，拧紧柱盖后，用压缩空气推动柱下方的活塞向上推压，将填料压紧。分离完毕，将柱盖打开，通过活塞将填料顶出，分段切割后，用溶剂萃取回收已分离的组分，填料可反复使用。

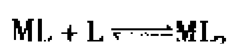
逐步回归 stepwise regression 一种在回归方程中逐步引入自变量的多元回归分析方法。在建立多元回归方程时，将自变量逐个引入方程，对引入方程中的每个自变量的偏相关系数进行统计检验，效应显著者留在方程内，循此再遴选下一个自变量。引入新的自变量后，由于自变量之间的相互作用，有些自变量的效应有可能变为不显著，经统计检验确认后从方程中删去，只保留效应显著的自变量。依次类推，直到不再引入和删去自变量为止，从而得到最优的回归方程。

逐级形成常数 stepwise formation constant 当金属离子 M 与配体 L 形成 ML_n 型配合物时，ML_n 是逐级形成的，逐级形成反应对应的平衡常数称为逐级形成常数，常记为 $K_i(i=1,2,\cdots,n)$。例如（略去电荷）



$$M+L \rightleftharpoons ML$$

第一级形成常数 $K_1=\frac{[ML]}{[M][L]}$



$$ML+L \rightleftharpoons ML_2$$

第二级形成常数 $K_2=\frac{[ML_2]}{[ML][L]}$



$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$



$$ML_{i-1}+L \rightleftharpoons ML_i$$

第 i 级形成常数 $K_i=\frac{[ML_i]}{[ML_{i-1}][L]}$

$(i=1,2,\cdots,n)$ 逐级形成常数

着火温度 ignition temperature 在着火极限内，燃烧能自发地扩展到整个可燃混合气的最低温度。对于一种特定的可燃混合气，只有当燃气含量在可燃混合气中处在某一定范围内，并达到着火温度，燃烧才能开始，而且要求燃烧产生热量除了热辐射和热传导的损失之外，还能使邻近的可燃混合气温度提高到着火温度，这样才

能使燃烧持续下去，扩展到整个可燃混合气，形成火焰。空气-乙炔火焰的着火极限为2.5%～80%，氧化亚氮-乙炔火焰的着火极限为2.2%～67%。

主成分分析 principle component analysis 从一批变量中寻找较少数目的新变量，但仍能最大限度地保留原变量集所包含的信息的多元统计分析方法。所找到的新变量称为主成分，是原来变量的线性组合，是一组新的正交变量。

主成分回归分光光度法 principal component regression spectrophotome-try 用化学计量学中的主成分回归技术处理复杂体系的吸光度数据的一种分析方法。主成分回归是一种重要的多元校正分析法。该法先对校正组样品的吸光度矩阵进行主成分分析，将吸光度矩阵分解成规模较小的得分矩阵（score matrix）和载荷矩阵（loading matrix），然后对校正组样品的浓度矩阵和得分矩阵进行回归计算，计算出回归系数矩阵，建立主成分回归模型，依据此模型便可对未知样品进行浓度预报分析。主成分回归法能克服多元线性回归法中线性相关等问题，较好地解决了多组分体系分析的问题。

主成分回归-催化动力法多元光光度法 principal component regression-catalytic kinetic simultaneous determination 利用主成分回归方法处理催化动力法光度测定数据的一种分光光度分析法。在催化动力分光光度法中，假如多种组分对同一指示反应有催化作用，会引起严重干扰。传统的做法是对样品进行分离或掩蔽，进而完成对某单一组分进行测定。而用某些合适的化学计量学方法（如主成分回归）处理复杂多组分体系的催化动力测试数据，便可完成对多组分的同时测定。该法大大拓宽了传统催化动力分析方法的应用范围，对动力学分析法的发展有积极的意义。

主动耦合与被动耦合 active coupling and passive coupling AMX自旋体的相敏相关谱反映核间耦合关系的非对角峰将呈点阵。若X核（对角峰）所相应的F_2域来看其耦合的交叉峰（M，X）和（A，X）为两点阵，其中直接反映对应于这两个核组之间的耦合（耦合常数分别为J_{MX}和J_{AX}）的交叉峰之间为主动耦合，主动耦合的峰呈反相的吸收峰形，从一对反相位点直接可读出该两核之间的耦合常数$|J|$。在这点阵中由于AMX体系的主动耦合的交叉峰又都被第3个^{1}H进一步耦合裂分，有J_{AM}，这种耦合称为被动耦合。被动耦合的峰在非对角峰点阵中以相同相位出现，可从一对同相相位点直接读出它们的耦合常数值。

主光线 principle ray 在光学系统中，都有一个尺寸最小的光阑（特设的或某一个光学元件的通光边框）限制可通过光学系统的光束尺寸，称为孔径光阑。孔径光阑在光学系统物方和像方分别所成的像叫做入瞳和出瞳。通过孔径光阑中心行进的一条光

线在光学系统成像和像差校正方面具有特殊的重要意义，决定成像中心位置和各种像差值，因此特别称此过孔阑中心的一根光线为光学系统主光线。因为入瞳—孔阑—出瞳的共轭关系，主光线必定也通过入瞳和出瞳中心。

主-客体络合物 host-guest complex 由构成基本骨架的分子（主体）与被结合的其他分子（客体）之间相互作用形成的络合物。主客体分子间的相互作用力可以是很强的化学结合，也有通过主体分子几何空间上的官能团产生的弱分子间作用力。如环糊精与其尺寸匹配的客体形成的包结络合物、层状络合物等。

主体 host 通过分子间相互作用，一分子将另一分子包结形成复合体。一般将包结的一方称主体（host）或受体（receptor），被包结一方称为客体（guest），主客体包结物称为主客体络合物。各种具有特异识别选择性的主体分子的设计与合成是分子识别化学研究的关键。利用适当介质中多个主体分子与客体之间超分子的形成可以简化主体分子的合成，是分子识别研究中今后发展的方向。

主体浓度 bulk concentration 在任何涉及建立浓度梯度的电化学技术中，在电极内部或者在与电极接触的溶液中，物质的主体浓度是某些地点物质的总浓度或分析浓度，这些点离电极溶液界面是如此遥远，以致在所考虑的时刻，物质的浓度梯度为零。通常物质的主体浓度被看作是当电流不通过电解池和电极与溶液之间不发生任何反应时，存在于电极和溶液各处的物质的总浓度或分析浓度。能够产生物质或消耗物质的任何均相反应或者其他过程均不存在时，物质的主体浓度就是加上激发信号以前物质的总浓度或分析浓度。

主效应 main effect 在无其他因素协同作用的条件下，因素本身对试验指标的影响。

主值 principal value 见主轴条。

主轴 principal axis 在 ESR 参数中，如 g 因子、超精细耦合常数等，很多都是张量。对于这些在直角坐标系 xyz 下的张量，总能经过坐标转换后使其对角化。使其对角化的直角坐标系 XYZ 的 3 个轴就是此张量的主轴，其对角元对应张量的主值。

助熔剂 assistant flux 助熔剂以硼砂为代表，大多是低熔点物质。其作用是降低试样的熔点，有助于试样的熔化、从而破坏试样中的分析元素的晶格结构，防止蒸发过程中的喷溅现象，消除晶格结构对谱线强度的影响。

助色团 auxochrome group 分子中本身不吸收辐射而能将分子中生色基团的吸收峰向长波长移动并增强其强度的基团，如羟基、胺基和卤素等。当吸电子基（如—NO_2）或给电子基（含未成键 p 电子的杂原子基团，如—OH，—NH_2 等）连接到分子中共轭体系时，都能导致大 π 键电子云流动性增大，分子中 $\pi\rightarrow\pi^*$

跃迁的能级差减小，最大吸收波长移向长波，颜色加深。这些基团被称为助色团。从上可知，它可分为吸电子助色团和给电子助色团。

注入体积 injection volume 通常指旋转注入阀上采样环的内体积，以 μl 表示。这是基于体积的一种进样方式。对于中度分散以上的 FIA 体系，峰高与注入的试样体积成正比。因此，增大注样体积可增加测定的灵敏度，而减少注样体积则是稀释高浓度样品的最好方法。

注射泵 syringe pump 类似注射器结构的高压输液泵。此泵相当于一个大的注射器，柱塞相当于注射器的芯，它的缸体积较大，通常为数百毫升。它一次吸满溶液后，柱塞以恒定的速度慢慢地向里推进，溶液以一定的速度吐出，这个过程不产生脉冲。活塞缸中的溶液吐完后，柱塞回到原来的位置，再次吸入流动相，这种复原的速度可以比恒速推进时的速度快。这种泵输液时的流量由柱塞的移动速度决定。其特点是能以恒定流量输送流动相，而与操作压力无关。螺旋注射泵就是以螺旋传动方式推动柱塞移动的注射泵，是早期液相色谱仪常用的恒流泵之一。

驻电体热分析 electret thermal analysis 把在外加电压下冷却的试样，去掉电压，把电极短路，在等速升温的情况下检测电流的方法。驻电体是把电介质在施加电压的情况下经冷却形成的，此时分子运动呈冻结状态，取向的电偶极子也被冻结，在这种状态下，去掉电压电偶极子仍处于取向状态。随后，将电极短路，并升高温度，在分子开始运动的同时，电偶极子从取向状态恢复至无序状态，有电流流过，因此，该法也称为热释电流法。该法可用于检测半导体、聚合物等材料的热释电流。例如，测定半导体材料的热释电流，并根据观察捕获电荷的释放来阐述陷阱能级的深度等导电机理。

柱端电导率检测 out-let end detection of electrical conductivity 直接将微电极放在毛细管的出口端，利用微电极与接地电极间的交流电路测量电导。

柱负载能力 column loadability 在色谱分析或制备中，一定色谱条件下允许的最大进样量（体积或质量）。它对于比较不同色谱体系的性能是有用的。

柱后衍生化 post-column derivatization 使被测物在色谱柱上分离后，将柱流出物与衍生化试剂反应转变成易于检测的形式，即衍生化过程是在分离之后进行的。这是液相色谱中最常见的衍生化形式，例如可将被测物转变成具有紫外、可见光吸收或荧光发射的形式，以便于采用常用检测器检测。

柱老化 column ageing 在气相色谱中，新制色谱柱（或经长久存放的色谱柱）在使用前必须进行老化处理，目的是除去固定相中的残余溶剂和挥发性杂质，也可使固定液更均匀地、牢固地分布在载体表面上，以

便得到性能稳定的色谱柱。柱老化的方法是：把色谱柱的一端接入系统，另一端先处于放空位置，老化一段时间后再接入检测器进行检验，色谱柱温度从低到高缓慢上升至最高温度（最高温度指稍高于操作温度 20～30℃，切忌高于固定液的最高使用温度），用与正常操作时相近的载气流速，通入载气处理几小时到十几小时，当检测器基线平直后，老化过程即可终止。

柱流出物 （column）effluent 在液相色谱中，指从色谱柱流出的包含了溶质的流动相溶液。柱流出物被导入检测器进行检测。

柱流失 column bleeding 指在液-液或气-液色谱操作过程中柱内固定液所造成的损失。在气-液色谱中，流失的原因多为柱温超过固定液的最高允许使用温度，固定液有部分挥发，随载气流出柱外造成损失。在液-液色谱中，流失的原因多为流动相对固定液的部分溶解，随流动相流出柱外造成损失。固定液流失的后果是造成色谱柱性能不稳定，基线噪声严重，检测灵敏度降低，在制备色谱中使被收集的组分受到污染，因此必须尽量避免。

柱内径 column internal diameter 色谱柱管内部的直径。液相色谱填充柱内径通常在 3～5mm，典型的柱内径是 4.6mm。气相色谱中所用毛细管柱的内径小于 1mm。

柱偏转分析器 cylindrical deflector analyzer；CDA 静电偏转型分析器中的一种。由内外两个扇形圆柱面组成，偏转电压加于两个柱面之间，电子从两个柱面之间通过时发生偏转。

柱前衍生化 pro-column derivatization 将被测物与衍生化试剂反应生成目标衍生物后，以此衍生物为样品进样至色谱柱中分离的方法。柱前衍生化要求衍生产物具有很好的稳定性和良好的色谱保留行为。

柱切换技术 column switching technique 在色谱系统中利用多通阀改变流动相流向，或改变分离柱与分离柱之间、分离柱与进样器或检测器之间的连接方式的技术。其应用包括样品预富集、分段切割、样品制备、溶剂选择和梯度洗脱、色谱柱选择、检测器选择、辅助流路的开闭等等。

柱清洗 column cleaning 将使用过程中玷污的色谱固定相用适当的溶剂进行冲洗的处理过程。如固定相上吸附强保留物质后需用强的溶剂冲洗。

柱容量 column capacity 又称柱负荷。对分析色谱柱，是指在不影响色谱柱效能的情况下的最大进样量；对制备色谱柱，是指在不影响收集物纯度的前提下的最大进样量。在色谱分析中，进样量的体积和样品的总质量对分离效能都有明显的影响，当样品的进样量过大时，被分离组分峰的保留时间将发生变化，有变小的趋势，同时分离度迅速变坏。

柱入口压力 column inlet pressure 又称柱前压或柱压。参见**柱压**条。

柱色谱法 column chromatography

将色谱填料装填在色谱柱管内作固定相的色谱方法。根据色谱柱的尺寸、结构和制作方法的不同，又可分为填充柱色谱和毛细管柱色谱。

柱上检测 *on-line detection* 在毛细管上适当的位置处开一透光窗口，混合组分中由于各个组分的电迁移速度不同，在毛细管电泳分离过程中形成各自的区带，逐个迁移，依次通过检测窗口而被检测。

柱渗透性 column permeability 表示流动相溶液通过填充了填料的色谱柱的难易程度，柱渗透性 K° 与柱压降 ΔP、流动相流速 F、流动相黏度 η、柱长 L 和填料孔隙度 f 之间的关系如下

$$K^{\circ}=\frac{F\eta Lf}{\Delta P}$$

柱寿命 column life 一根色谱柱在良好分离状态下能正常使用的时限。色谱柱的寿命与所用固定相的性质、制柱过程和色谱操作条件有极密切的关系。如吸附剂活性的改变、固定液的流失、毛细管壁液膜的破裂、流动相或样品中的杂质使固定相受到污染或堵塞等，都会大大降低色谱柱的寿命，甚至使其不能再使用。一般色谱柱的寿命为半年到一年，如当被分离组分的绝对或相对保留值发生较大变化且柱效有明显下降时，则应对色谱柱进行再生处理或更换新柱。

柱头进样 column head sampling 采用特制的柱头进样器，直接把样品注射到柱子顶端的一种进样方法。其目的是为避免分流而引起的样品歧视现象，以提高分离的精度。在柱头进样器的顶部，有一个锥形导管和特制注射器进入的通道，此通道的内径要与注射器的外径相匹配，在进样器底部通入冷空气，使注入的样品溶液呈液态，在进样的过程中，色谱柱柱头进样区应保持温度恒定，以避免样品产生歧视。使用柱头进样时，通常是在程序升温条件下工作。

柱外效应 extra-column effect 由色谱进样系统、连接管路、检测器以及其他色谱柱之外的各种因素所引起的谱带展宽效应。在气相色谱中，由于柱有效体积占色谱流路系统总体积的比例很大，柱外效应比较小。而在液相色谱中，柱有效体积占色谱流路系统总体积的比例小，且溶质在液相中的扩散系数小，所以，柱外效应比较严重。

柱温箱 column oven 色谱仪中用于对色谱柱和检测器等部件进行恒温的装置。柱温箱通常能在室温至80℃范围内进行控温。

柱效 column efficiency 柱效是指溶质通过色谱柱后，其区域宽度增加的程度，它与溶质在两相中的扩散及传质情况有关，也即柱效是由色谱柱分离中的动力学因素所决定的色谱分离效率，通常用理论塔板数 n 或理论塔板高度 h 表征。改善色谱柱性能和操作条件可以提高柱效。

柱压 column pressure 又称柱前压或柱入口压力。是色谱柱填料阻碍流动相流动，在柱前形成的压力。色谱仪正常工作时的柱压通常为数兆

帕、泵单元或控制单元上有当前柱压的显示。不同年代和不同国家生产的色谱仪的柱压表示单位不尽相同，常用的单位有巴（bar）、千克力每平方厘米（$kgf \cdot cm^{-2}$）和大气压（atm）。（注：$1bar = 10^5 Pa$，$1kgf \cdot cm^{-2} = 9.807 \times 10^4 Pa$，$1atm = 101325Pa$）

柱再生　column regeneration　指将使用后性能有所下降的色谱柱通过适当的方法使其性能得以恢复的处理过程。如离子交换色谱柱长期放置会因树脂收缩导致性能降低，可通过用合适流动相溶液慢慢浸润的方法加以再生。柱再生必须根据柱填料性质和使用条件，采用适当的再生方法。

柱中衍生化　on-column derivatization　又称在柱衍生化。被测物与衍生化试剂的衍生化反应是在分离过程中完成的。通常是将衍生化试剂添加在流动相中，当被测物进样到色谱柱中接触流动相时，就会与衍生化试剂反应生成目标衍生物。柱中衍生化要求衍生化反应的速度很快，生成的衍生物具有很高的稳定性。

铸膜法　cast film technique　红外光谱技术中的一种制样方法。选择合适的溶剂，将样品溶解成一定浓度的溶液（一般为1%～5%），然后在晶体板（氯化钠、溴化钾或KRS-5）上用玻璃棒涂膜，待溶剂完全挥发后，即可用于红外光谱测试。

专家系统　expert system　应用人工智能技术，以一个或多个人类专家提供的特殊领域知识和经验为基础而建立起来的模拟人类专家解决复杂问题的计算机智能推理系统。专家系统不同于一般的数据库和知识库，不是储存现成的答案，而是对输入的信息进行处理，并应用知识进行推理和演绎，做出判断和决策。它主要由知识库和推理机构两部分组成，具有知识信息处理、咨询解释、根据不确定（不精确）知识进行学习和推理、系统扩充等功能，能进行符号操作和计算机快速准确的优点。

专一化学位移相关谱　exclusive correlation spectroscopy；E-COSY　E-COSY 的基本脉冲序列为

$90° - t_1 - 90° - \tau - 90° -$ 采集 FID（t_2）
（采用相循环）

它简化了交叉峰，只显示按能级图直接关联的跃迁的信号，这样在耦合网络中的被动耦合峰消失。对角信号皆同相，这使靠近对角线的交叉峰变得容易观测。原则上，E-COSY 技术由多量子滤波相关谱的组合而成。当改变相循环方式时可以只显示被动耦合峰。用于异核分解谱中，可以获取小的异核自旋耦合常数。

专一性　specificity　亦称专属性，或特效性。分析化学中当一种试剂只与一种离子或物质发生反应，而不与其他离子或物质发生类似反应时，则该试剂可称为专一性试剂，该反应称为专一性反应。实际上专一性试剂和专一性反应非常少。$NH_4^+ + OH^- \longrightarrow NH_3\uparrow + H_2O$ 的反应通常被称为检出 NH_4^+ 的专一性反应，严格说来亦不是，因 CN^- 与 NaOH 在加

热条件下反应：$CN^- + 2H_2O \longrightarrow NH_3\uparrow + HCOO^-$ 亦释放出具特征气味的 NH_3。若在试液中加入少量 $HgCl_2$ 使之与可能存在的 CN^- 结合，则 $NH_4^+ + OH^- \longrightarrow NH_3\uparrow + H_2O$ 的反应才真属专一性反应。专一性试剂和专一性反应的开发可大大简化分析过程。

专用仪器 dedicated instrument 为特定的分析检测要求专门设计制造的仪器。专用仪器不追求仪器应用范围广，只为满足特定的分析检测要求而工作，因此具有仪器结构简单、不配置不必要的附件，但对特定分析检测要求具有可靠、方便、准确的工作特性。因此，专用仪器一般有比较实用、价廉、稳定可靠等特点，特别适用于分析检测要求明确、使用率高、应用量大的场合。例如汽车尾气污染成分检测器、水中油分分析仪、个人用血糖分析仪等等。

转导 transductant 遗传物质（DNA 或 RNA）从噬菌体传给细菌，或在细菌之间以“转导噬菌体”为媒介进行传递的过程。

转动光谱法 rotational spectroscopy 为防止激光对样品的破坏（光分解、热分解或热变性等），在测定光谱时，样品池不断匀速转动，从而不致造成光或热的分解，这种测定光谱的方法称为转动光谱法。

转动拉曼散射 rotational Raman spectroscopy 是由分子转动引起的分子极化率的改变而测得的散射光谱。而由分子的振动和转动产生的拉曼光谱，统称为分子的拉曼光谱。

转化定量法 trans-quantitative method 将欲分析的组分在进入检测器前都转化为同一组分进行测量（如转化为 CO_2、CH_4 等）以使定量校正工作简化的一种分析方法。尤其当被分析组分校正因子的测量存在某种困难时，转化法的优点就更为突出。例如当分析含有醇、醛、酮、酸等的混合物时，可将色谱分离后的各组分通过装有催化剂的反应管并引入 O_2，使有机物完全燃烧并定量地转化为 CO_2，然后用热导检测器进行检测。

转基因食品检验 examination of genetically modified organisms foods 随着基因工程技术的高速发展，转基因产品的品种和数量在不断增加。由于其生态学风险和生物安全性仍没有最后的定论，因此，检验检疫系统对进入我国的转基因产品的检验和监测在不断地加强。目前聚合酶链式反应（polymerase chain reaction，PCR）技术已被应用在转基因产品的检测中。PCR 技术是根据转基因产品 DNA 中含有一段特异的外源基因片段，而相应的非转基因产品 DNA 中不含有这段特异的基因片段。针对转入的外源基因中的这一标记基因 GUS 设计一对引物，经过 PCR 循环，扩增出 GUS 基因上与两引物互补的一对碱基之间的特异性扩增产物；而非转基因产品 DNA 上没有相应的碱基系列，故不能进行基因扩增。PCR 扩增物进行琼脂糖凝胶电泳、用紫外分析仪进行观察测定。

转角器 goniometer 又称测角器。若要准确测量 ESR 的各种参数（特别是各向异性参数），需对顺磁物种的单晶样品进行不同角度的 ESR 谱测定。将单晶样品按一定取向安置在转角器上，即可旋转单晶，改变单晶晶轴与外磁场的夹角，从而测量不同角度取向的 ESR 谱。转角器有二维转角器和三维转角器之分。

转染 transfection 转染是对真核细胞而言，系指用离体状态的病毒 DNA 或 RNA 感染感受态细菌而使细菌的基因型发生改变，形成新的病毒颗粒。

转子 rotator 用液体高分辨 NMR 谱仪测量样品时，样品需灌入平直薄壁的玻璃管内，通常用氘代溶剂配制成黏度较小的溶液。在玻璃管开口处套上一个具有一定几何形状的转子，当压缩空气吹过转子时，形成涡旋气流托起样品管并使它绕样品管轴方向旋转，以平均掉垂直于旋转轴平面上的磁场不均匀性来提高分辨率。样品管的旋转速度必须满足：$f(\mathrm{rad}\cdot\mathrm{s}^{-1}) > \frac{\gamma\Delta B}{2\pi}$，$\Delta B$ 为样品范围内的磁场的不均匀量。转速越快平均效果会越好，但太快会使试样液面产生旋涡过深，反而破坏磁场均匀性，一般在 10～30Hz 范围内为宜。对于固体样品为获得高分辨谱需要将试样装入特制的称为涡轮转子或转子的锥底小管内作高速的魔角旋转。

撞击球 impact bead 又称雾化球。安装在喷雾器前方的玻璃或塑料球状物。喷雾器喷雾形成的雾珠和气溶胶，粒径分布范围宽，大粒径的占的比例较大。由喷雾器出来的雾珠和气溶胶撞击在雾化球上，气流方向发生改变，增大了速度梯度，导致雾珠和气溶胶粒径减小，产生更多的粒径小的气溶胶。当由气溶胶表面张力形成的内压力与气流动压力达到平衡时，气溶胶粒径不再变小，形成稳定的气溶胶，随气流输送到燃烧器。

准弹性光散射 quasi-elastic light scattering 在散射成分中含有丰富的频率位移信息，其频率位移最小的中心部分称为准弹性光散射。在准弹性光散射中，由于散射质点的热布朗运动，导致熵的涨落引起了散射光频率的微小移动。涨落引起的频率位移的实质是多普勒效应，由于该效应，对处于静止参考系中的观察者来说，运动质点辐射的次波频率（散射光频率）要发生相对于入射光频率的移动。准弹性光散射测量的是由多普勒效应所引起的散射光频率微小位移及其对散射角度的依赖性。

准分子激光器 excimer laser 准分子是一类特殊的分子，它只在电子激发态时是束缚的分子，而在基态时不稳定，发生离解。准分子是一种短寿命分子，常见的这类分子有 Ar_2、Kr_2、XeO、XeF、ArF、KrF、XeCl、HgCl 等。准分子激光器是以准分子为激光介质，快速的高功率泵浦为激发光源的一类激光器。下页表为一些准分子介质的工作波长。

准分子	Xe_2	Kr_2	Ar_2	KrF
波长/nm	176	146	126	248
准分子	ArF	XeCl	XeBr	XeI
波长/nm	193	308	282	254

准分子离子 quasi-molecular ion 又称伪分子离子(pseudo molecular ion)。由于这个术语不够确切，现在已不提倡使用。

准光镜 collimator 又称准直管、平行光管。光谱仪的主要光学元件之一，其作用是把从狭缝来的光准直为平行光束，而后再投射到色散元件(棱镜或光栅)上去。因此，光谱仪的狭缝位置必须处于准直管的焦点处。用透镜作准直管时，由于透镜材料存在色差，即对不同波长的光的折射率不同，实际上只能使从狭缝来的光辐射中的某一波长的光成为平行光束，而其他波长的光只是接近平行光而已，因此往往采用复合透镜组作准直管，加以改进。也可采用凹球面反射镜作为准直镜，以消除色差。平面光栅光谱仪大都采用球面准直管。

准可逆波 quasi-reversible wave 电流同时受扩散速率和电极反应速率控制的伏安曲线。

准确度 accuracy 在一定实验条件下多次测定的平均值与真值相符合的程度。准确度表征系统误差的大小，以误差或相对误差表示，误差或相对误差越小，准确度越高。已定系统误差可用修正值来修正，未定系统误差可用不确定度来估计。在不知道真值的情况下，无法估计和确定准确度。在实际工作中，通常用标准物质或标准方法进行比对试验，在无标准物质或标准方法时，常用加入被测定组分的纯物质进行回收试验来估计与确定准确度。测量精密度好是获得好的准确度的先决条件，测量精密度不好，不可能获得良好的准确度。

准确度控制 accuracy control 在分析测试中为控制测试结果的系统误差在所允许的范围内所必须的全部有计划有系统的技术与管理活动。所采取的技术和管理措施有：使用标准物质，与标准方法进行比对，进行加标回收试验，使用密码样品和管理样品进行质控，采用双样图和质量控制图等。其目的是使测定结果的准确度满足预期的要求。

准直管 collimator 见**准光镜**条。

浊度 turbidity 顾名思义是溶液体系浑浊的程度。影响浊度的因素首先是沉淀物质的含量，其次是形成沉淀的条件诸如酸度、温度及溶剂性质等。

浊度测定法 turbidimetry 利用浊度进行分析测定的方法。定量分析的基础是校正曲线。将一系列标准溶液在一定的反应条件下生成沉淀，待稳定后，测定其吸光度，建立校正曲线，据此进行定量分析。

浊度法 turbidimetry 即比浊法。参见**比浊法**条。

浊度计 nephelometer 是专用于检测环境水、饮用水、饮料、针剂等液体试样中悬浮浑浊度的分析仪器，在

城市自来水厂进水和出水水质检测、液态产品质量控制领域应用广泛。浊度计通常采用光学分析原理，主要有两种：检测光线入射和出射液样前后的强度差别的比浊计（检测因液样中悬浮微粒的光散射和光吸收作用而造成的光强度损失），检测光入射后被悬浮微粒散射射出的光强度的散射浊度计（一般在与入射光方向90°的侧向检测散射光强度）。散射浊度计灵敏度很高，利用激光散射浊度仪甚至可以检测出生物抗体-抗原作用后生物分子大小变化而造成的微浊度变化（用于癌症早期诊断等工作）。

着色剂 colour agent 使食品着色和改善食品色泽的物质，通常包括食用合成色素和食用天然色素两大类。食用合成色素主要指人工化学合成方法所制得的有机色素，目前世界上允许使用的合成色素几乎全是水溶性色素。食用天然色素是来自天然物，且大多数是可食资源，利用一定加工方法所获得的有机色素。它们主要是在植物组织中提取的，也包括来自动物和微生物的一些色素。

子离子 daughter ion 由选定的母离子产生的离子。目前更推荐使用具有相同意思的 product ion 一词。

子离子扫描 product ion scan 串联质谱法中的一种最常用的扫描方式。通过第一级质谱的质量分离，选出欲分析的母离子，经碰撞活化，形成一系列的碎片离子（子离子）。通过母离子和相关碎片可以推知该化合物的结构信息。

紫外分析仪器 ultraviolet analyzer 通常特指用于工业生产过程在线分析检测的紫外分析器（各种实验室用紫外-可见分光光度计不属此列）。紫外分析仪器利用物质分子在紫外区的光吸收特点，采用紫外光源（特制的高强度紫外灯）和紫外滤光片检测特定分子在其吸收峰处的光强变化，然后推算出该组分（分子）的浓度。工业在线紫外分析仪器通常对明确的分析对象完成快速、可靠的在线定量分析监控任务。

紫外光电子能谱 ultra-violet photo-electron spectroscopy; UPS 主要使用紫外能量范围的光子激发样品价壳层电子，分析样品价壳层轨道结构、能带结构、空态分布和表面态情况的光电子能谱。是研究固体表面能带结构和电子态最常用的方法。

紫外光度法测定蛋白质 determination of protein by UV-spectrometry 一种快速测定蛋白质含量的方法。蛋白质及其降解产物（如胨、肽和氨基酸等）在280nm有吸收，吸光度与蛋白质浓度（3～8mg·ml^{-1}）成直线关系，因此，通过测定蛋白质溶液的吸光度，即可由标准曲线求出样品蛋白质含量。标准曲线事先用凯氏定氮法测定蛋白质含量绘制。为了保证所测蛋白质的活性和测定结果的准确性，常需要恒温测量。另外，由于最大吸收蛋白质在280nm，核酸在260nm，峰谷是230nm，特定蛋白质在此三个波长下的摩尔吸光系数是一定的，因此在生化分析上常可用此三波长的吸光度

比值来确定某种蛋白质的纯度，也可用于定量分析。

紫外光区 ultraviolet region 光是一种电磁波，按其能量或波长可分为不同的光区。紫外光是波长比可见光短的光，紫外光区大致是指 200～400nm（有指 200～360nm，不统一）波长的光，对应频率约 10^{15}～7.5×10^{14} Hz，属分子的价电子或非键电子跃迁产生的辐射。

紫外激发共振拉曼光谱 ultra-violet laser resonance Raman spectroscopy 紫外激发共振拉曼光谱测定中所用的激发光源的波长是在紫外区（200～380nm），所测物质恰好在紫外区有强烈的吸收，若选取与物质的紫外吸收峰相近的波长作为激发光源，则所得的拉曼光谱即为紫外激发共振拉曼光谱。它显著地增强了拉曼效应，从而大大提高了拉曼光谱的灵敏度。例如，1987 年 Copeland 等建立了一种用紫外激发共振增强的拉曼光谱酰胺Ⅱ谱带测定蛋白质二级结构的方法，所用的紫外激发波长分别是 200nm 和 192nm。

紫外-可见分光光度法 ultraviolet and visible spectrophotometry 化合物定性和定量分析的一种常见方法。当紫外-可见光（波长大约在 180～780nm）照射到某些有机化合物（主要是不饱和化合物）和无机化合物（主要是金属配合物）上时，分子会发生从低电子能级向高电子能级的跃迁，并吸收与电子能级差相对应的光的能量，显示分子的特征吸收光谱（或称为电子光谱、电子带状光谱）。通过吸收光谱峰的位置、形状可以进行化合物的定性分析；利用各波长下的吸光度与化合物浓度的比例关系（比尔定律）可以进行化合物的定量分析。这种方法称为紫外-可见分光光度法。

紫外-可见光检测器 ultraviolet visible detector；UV-Vis 是光源部分可同时提供紫外和可见光的分光光度计。它实际是紫外检测器和分光光度检测器二者合一的检测器，通常所说的紫外检测器基本上都是同时可进行可见光检测的紫外-可见光检测器。

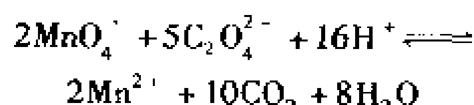
紫外吸收检测器 ultraviolet absorption detector 简称紫外检测器（UV）。是基于溶质分子吸收紫外光的原理设计的检测器。因为大部分常见有机物质和部分无机物质都具有紫外吸收性质，所以该检测器是液相色谱中应用最广泛的检测器，几乎所有液相色谱仪都配置了这种检测器。它不仅有较好的选择性和较高的灵敏度，而且对环境温度、流动相组成变化和流速波动不太敏感，因此既可用于等度洗脱，也可用于梯度洗脱。其检测灵敏度在 $\mu g\cdot L^{-1}$ 至 $mg\cdot L^{-1}$ 范围。

紫外Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ型感光板 UV-Vis Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ types of photographic plate 天津感光胶片厂出产的光谱感光板的三种型号。紫外Ⅰ型感光板，灵敏度：12±5，反衬度：3.0±0.2，雾翳：<0.06，感色范围：250～500nm；紫外Ⅱ型感光板，灵敏度：20±5，反衬度：2.0±0.2，雾翳：<0.06，感色范围：

250 ~ 500nm；紫外Ⅲ型感光板，灵敏度：20 ± 5，反衬度：2.8 ± 0.2，雾翳：< 0.06，感色范围：200 ~ 400nm。其中紫外Ⅲ型感光板是经水杨酸钠增感的，使用波长范围可扩展到200nm。

自电离谱 self-ionization spectroscopy 利用自电离过程检测自电离发射电子的光电子能谱。其原理是当光子能量足够产生一个激发态，该激发能量超过其他电子的能量，则重新产生电子发射。自电离过程第一步只产生样品原子的激发，此后发射电子的过程与俄歇过程相似。自电离过程与共振吸收，与组态相互作用有较密切的关系。

自动催化反应 auto-catalytical reaction 反应产物本身能起催化作用的反应。例如，在酸性介质中用 $KMnO_4$ 滴定 $C_2O_4^{2-}$ 溶液时，其总反应为



$$2MnO_4^- + 5C_2O_4^{2-} + 16H^+ \rightleftharpoons 2Mn^{2+} + 10CO_2 + 8H_2O$$

开始反应速度很慢（表现在 MnO_4^- 的特征紫红色褪得很慢），但随滴定的进行反应速度愈来愈快，这是由于反应产物 Mn^{2+} 本身起着催化剂的作用。

自动化活化分析 automatic activation analysis 整个活化分析及其分析数据处理均在无人干预下，由计算机按事先指定的程序控制自动化仪器来完成的活化分析。优点是自动化程度高，但设备昂贵，目前仅用于性质相同的大批量样品的常规分析。

自动进样器 automatic sampler 用计算机控制阀采样（通过阀针）、进样和清洗操作的进样装置。其主要部件包括电机、蠕动泵、带样品环的电动多通阀和感应元件。它适合同样色谱条件下样品数较多或无人看管的自动色谱仪。

自动凯氏定氮仪 Kjeldahl's autosystem for nitrogen determination 一种以凯氏定氮法测定原理为基础自动测量氮素含量的仪器，一般包括消化（消煮）系统、蒸馏系统、滴定系统、数据显示和处理系统几部分，该仪器是定氮分析的最常用仪器。

自动牛奶分析仪 automatic milk analyzer 一种自动分析牛奶中蛋白、脂肪、乳糖等含量的红外光谱仪器。牛奶的三种主要成分在中红外区都有吸收，脂肪羰基特征吸收为 1745 cm^{-1}，蛋白中的氨基的特征吸收为 1548cm^{-1}，乳糖的羟基的特征吸收为 1042cm^{-1}，可采用水参比扣除法或参比波长扣除法进行定量分析，此仪器的测定数据已获 *AOAC* 认可。

自动生化分析仪 automated biochemical analyser 在同一台仪器上自动进行吸样、吸试剂、混合、去干扰物、保温、检测、结果计算、报告打印的生化仪器，称为自动生化分析仪器。

自动匀场 auto-shim 对接收的信号施加匀场调制振荡，随着仪器分辨变化时能获得一个电压差反馈到匀场电源上，控制匀场电流达到稳定分辨率的目的。自动匀场器其实就是分辨率稳定器。一般磁铁谱仪样品绕 *y* 轴旋转、*xz* 平面上的磁场不均匀性因

旋转基本上被平均掉，而 y 方向的磁场不均匀性却不能平均掉，要控制 y 轴匀场线圈中的电流。超导谱仪样品管绕 z 轴旋转，垂直于 z 轴平面内的磁场不均匀性基本上被平均掉，但 z 方向的磁场不均匀性却不能平均掉，要控制 z 轴匀场线圈中的电流。

自发发射 spontaneous emission 没有入射辐射的诱导，处于较高能态的激发态原子自发跃迁到较低能态伴随产生辐射的过程。处于激发态原子的平均寿命很短，约为 $10^{-7} \sim 10^{-9}$s，它有由较高能态自发跃迁到较低能态的倾向，在 dt 时间内，自发发射的原子数 dN_{ji} 与处于较高能态 j 的原子数 N_j 成正比：

$$dN_{ji} = A_{ji}N_j dt$$

式中，A_{ji} 表示单位时间内原子通过自发发射由较高能态 j 自发跃迁到较低能态 i 的几率，只与辐射体的性质有关，它的数值范围，强谱线约为 $10^8 \cdot s^{-1}$，弱谱线约为 $10^4 \cdot s^{-1}$ 或更小。自发发射跃迁的特点是，激发态原子各自独立地自发地发射辐射，所发射的辐射频率相同，彼此之间没有固定的位相关系，偏振方向和传播方向是随机的。原子由最低激发态跃迁到基态发射的谱线，称为共振线。共振线的激发能最小，原子最容易激发到最低激发态，因此，共振线是原子光谱中的最强的谱线。

自发拉曼散射 spontaneous Raman scattering 光入射到物质上时，光子会被物质分子碰撞从而形成弹性散射或非弹性散射。弹性碰撞时光子与分子没有能量交换，因而散射光的频率没有改变，仍保持入射光频率，这就是瑞利散射等光波长不变的弹性碰撞。若光子与分子碰撞时，光子将部分能量转移给分子使其振动或转动能级激发，或反之原处于激发能级的分子将部分能量转移给光子，使光子能量增加，就使散射光频率发生变化，客观上出现在瑞利散射谱线两侧出现频率有正负增量的散射线，这种现象称为拉曼散射，拉曼线的频量增量（或波数增量）值与分子的振动或转动能级差相当。

自然腐蚀电位 free corrosion potential 没有净电流在研究材料表面流入或流出时的腐蚀电位。

自然线宽 nature linewidth 同发生跃迁的能级有限寿命相联系的谱线宽度。谱线自然宽度的线型函数为洛伦兹函数、线型函数两翼半高度处相应的频率 ν_1 与 ν_2 之间频率的跨度 $\Delta\nu_N$，即为谱线的自然宽度。基态原子是稳定的，原子的有限寿命仅取决于激发态原子的平均寿命 τ。根据海森堡测不准原理，τ 作为跃迁时刻不确定度的量度 $\Delta t = \tau_N$，与能级的能量不确定度 ΔE 相当，ΔE 与 τ_N 满足测不准关系式，$\Delta E \cdot \tau_N \geq \frac{h}{2\pi}$，只有当激发态寿命无限长，$\tau_N \to \infty$，能级的能量不确定度 $\Delta E \to 0$，这时能级有严格确定的能量 E，谱线才是单色辐射。当 τ_N 为有限值时，ΔE 亦是非零的有限值，即能级的能量必有一定有限的宽度，谱线的频率在 $\Delta\nu_N = \frac{\Delta E}{h}$ 范

围内是不确定的，$\Delta\nu_N \geq \frac{1}{2}\pi\tau_N$，激发态原子的平均寿命 τ_N 约为 10^{-7} ~ 10^{-9}s，$\Delta\nu_N$ 约为 $10^7 s^{-1}$，$\Delta\lambda_N$ 约为 10^{-5}nm 量级。对于原子光谱线宽，与其他因素引起的变宽 10^{-4} ~ 10^{-3} nm 相比，自然宽度可以忽略不计。在其他波谱中，如在电子顺磁共振中，虽然是固定微波频率扫描磁场，但发生共振时所出现的吸收曲线亦非单色，亦存在由测不准原理所决定的一定宽度。

自身免疫性疾病 autoimmune disease 由抗体或 T 淋巴细胞与自身抗原决定簇反应而引起的疾病。现已发现数十种自身免疫病。

自身溶血试验 autohemolysis test 正常人血液用玻璃珠去纤维蛋白原抗凝，经 37℃ 孵育后，有轻微溶血。而遗传性球形、非球形细胞溶血性贫血症，溶血有不同程度的增加。经加入葡萄糖或 ATP 后，溶血得到不同程度纠正，借此鉴别不同溶血性疾病。

自体移植 autogrofting 献出移植物的个体和接受移植物的个体为同一个体时的移植。如以患者自体皮瓣修复某些缺损。不存在免疫排斥问题。

自吸变宽 self-absorption broadening 同种原子自吸效应引起的谱线轮廓的变宽的现象。自吸变宽是同种原子相互碰撞引起的压力变宽，随原子浓度增高而增大。随着谱线变宽，谱线强度减小，但减小的程度并不是原子浓度的线性函数，其结果导致工作曲线弯向浓度坐标轴。

自吸收校正背景法 Smith-Hieftje background correction method 史密斯（S. B. Smith）和希费蒂（Jr. G. M. Hieftje）提出的一种校正背景方法。当以低电流脉冲供电时，元素空心阴极灯发射锐线光谱，测得原子吸收与背景吸收的总吸光度，接着以高电流脉冲供电，元素空心阴极灯内积聚的原子浓度足够的高，发射线产生自吸，这时测得的是谱线附近背景吸收的吸光度，两次测得的吸光度相减，便可校正背景吸收。该法可在紫外可见区全波范围内校正背景吸收，可扣除吸光度高达 2 的背景吸收，适用于在高电流脉冲下谱线产生严重自吸的元素，对于自吸弱和不产生自吸的元素，测定灵敏度有很大的降低。

自吸效应 self-absorption effect 自吸效应使发射线在谱线的中心比两侧吸收更多的辐射，导致谱线形状和强度的改变。在火焰中心较热区域原子发射产生的光子，通过相同原子的冷蒸气时，再次被外围的同种元素的基态原子所吸收，后者变为激发态，再通过发射辐射、无辐射碰撞或内转换损失能量。由于在内部较热区域的原子运动更快，发射线的多普勒变宽比吸收线变宽更大，因此光源线的中心比边缘吸收更强。在低原子浓度时，吸收线具有高斯分布形状，随着浓度的增加，峰宽增加，但并不正比于原子浓度。这种效应随原子浓度、火焰厚度而增强。随着吸收线两翼展宽，而入射辐射仅限制在峰周围较窄

的波长范围，遇到较少的原子处于吸收状态，因此，吸收强度比预期的低，此称为自吸。在非常高浓度时，峰变得很宽，谱峰甚至完全消失，此称为自蚀。

自旋包 spin packet 在谱线非均匀增宽的情况下，样品中各个未偶电子是各自处于略微不同的有效磁场中，因此，当外磁场扫描时，在每一时刻都只有一小部分自旋所处环境完全相同，并处于共振状态。这些处在相同环境下的自旋集合称为自旋包。每个自旋包的吸收曲线是均匀增宽的，属于洛伦兹线型。实际观测的谱线是由各个自旋包的吸收曲线的包络形成的，属于高斯线型。参看**非均匀增宽**条。

自旋标记法 spin label method 抗磁性化合物是没有 ESR 信号的。如果将一顺磁性的报告基团（一般多为氮氧自由基基团）以共价键的形式与之相结合，借助于报告基团的 ESR 波谱信息来反映该报告基团周围环境的变化，从而了解抗磁化合物的物理、化学性质。自旋标记法在研究生物大分子、生物膜等方面有较多应用。

自旋标记物 spin label 在自旋标记法中，需使用顺磁性报告基团标记的化合物。这种报告基团应具备如下条件：第一必须是足够稳定；第二是能够以某种方式结合到被研究物质的某个部位上；第三，其 ESR 波谱的变化对环境的物理、化学性质极为敏感，而报告基团本身对体系的扰动却甚微。符合上述条件的顺磁性报告基团，并与被研究物质共价结合者称之为自旋标记物。与样品以其他方式结合者（例如嵌入）称为自旋探针。

自旋捕捉法 spin trapping method 有不少像 · OH、· OOH 一样的在常温下 ESR 很难检测出来的不稳定自由基，这种短寿命自由基通过与中性分子或离子的不饱和键反应被捕捉，可转换成相对稳定的自由基：不稳定自由基 + 自旋捕捉剂→自旋加合物（稳定自由基），从而通过解析该新自由基的 ESR 谱图，可以鉴定原来的不稳定自由基。这种方法称之为自旋捕捉法。

自旋捕捉剂 spin trap 在自旋捕捉法中用于捕捉不稳定自由基的化合物。常用的自旋捕捉剂多为具有双键的含氮氧基团的化合物，如 2-甲基-2-亚硝基丙烷（2-methyl-2-nitrosopropane，MNP）、苯基-*t*-丁基氮酮（phenyl-*t*-butylnitrone，PBN）、5，5-二甲基-1-吡咯啉-1-氧基（5，5-dimethyl-1-pyrroline-1-oxide，DMPO）等。

自旋-轨道分裂 spin orbital splitting 一种能级分裂现象。即当一个处于基态的闭壳层分子受光作用电离后，在生成的离子中必然有一个未成对的电子。只要这个未成对电子的角量子数 $L>0$，则必然会产生自旋-轨道间的耦合作用，发生能级分裂，于是在光电子能谱图上就表现出双峰结构。

自旋-轨道耦合 spin-orbit coupling 不同多重态之间的跃迁在量子力学上是自旋禁阻的，而借助自旋-轨道耦合作用可以使其成为可能。定性解释

是，电子的轨道运动诱导出一个磁场，它和电子的自旋磁矩相互作用。这种相互作用导致电子的自旋角动量的方向发生变化，这种机理称为自旋-轨道耦合。重原子效应就是重原子的存在增加了自旋-轨道耦合作用，使第一激发单线态向三线态跃迁的几率增大，因此荧光猝灭，磷光增强。

自旋-轨道耦合常数　spin-orbit coupling constant　在原子和分子中，未偶电子除了具有自旋角动量 $\boldsymbol{S}$，还具有轨道角动量 $\boldsymbol{L}$，其自旋磁矩和轨道磁矩会发生相互作用。在自旋哈密顿算符中自旋-轨道耦合项的表达式为

$$\hat{H}=\lambda\hat{L}\cdot\hat{S}$$

式中，λ 是自旋-轨道耦合常数，常用能量单位或波数表示，它代表了自旋-轨道耦合相互作用的大小。自旋-轨道耦合相互作用对于 g 因子及零场分裂都有很大影响。对于有机自由基及 s 基态的金属离子等，由于轨道角动量基本被猝灭，自旋-轨道耦合相互作用很小，g 因子都接近于自由电子的 g_e。常见的过渡金属离子有较大的自旋-轨道耦合常数，其中 $d^1\sim d^4$ 离子具有正的值，而 $d^6\sim d^9$ 离子具有负值。

自旋回波法　spin-echo method　测定横向弛豫时间 T_2 的一种方法。对体系施加一个出现回波信号的 $\left(\frac{\pi}{2}\right)_{x'}-\tau-\pi_{x'}$（或 $\pi_{y'}$）$-\tau$ 的脉冲序列，在第二个 τ 时刻前后区间观测到一个逐渐增至这个 τ 时刻达到极大值而后又渐渐衰减的信号，这就是自旋回波。回波的幅度与外磁场空间分布的不均匀无关。自旋回波幅度的衰减主要由自旋-自旋弛豫和自扩散过程决定。当 τ 值比较小时，自扩散影响较小而可忽略。回波幅度正比于 $\exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right)$，改变 τ 值，作一系列回波实验测得 2τ 时刻的信号强度，即可求 T_2 值，此即自旋回波法。

自旋回波相关二维谱　two dimensional spin echo correlated spectroscopy; 2D-SECSY　一种能通过自旋回波信息中获取与化学位移相关谱（COSY）相似的二维谱的方法。计算机的存贮较小时用。对于分子量较大的分子，为获取不致引起谱线折叠的谱图需用很大的数据库，可能超出一般谱仪计算机的存储量。为减少数据量，可降低 t_1 轴的取样频率。采集在施加的脉冲序列之后体系所形成的回波的后半期的信号而得谱。它的脉冲序列为

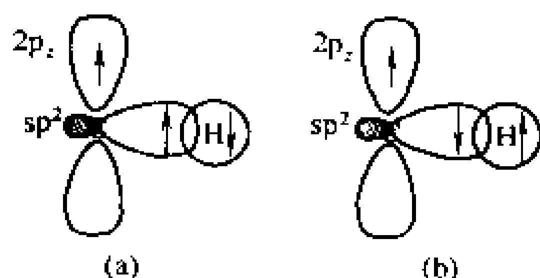
$$90°-\frac{t_1}{2}-90°-\frac{t_1}{2}-90°-\text{采集回波后半部分}\ (t_2)$$

本方法因 F_1 维的分辨率下降一半，并且灵敏度下降。因此现已很少用。

自旋回波相关谱　spin echo correlated spectroscop; SECSY　SECSY 与相关电子自旋共振谱（COSY-ESR）虽然都采用双脉冲序列，但有明显的不同。SECSY 的脉冲序列为 $90°-\frac{t_1}{2}-90°-\frac{t_1}{2}-$回波$-t_2$，这里有两个演

化期$\frac{t_1}{2}$，第 2 个演化期$\frac{t_1}{2}$后，会形成回波，t_2 为检测期，此时采集的是回波数据。经两次傅里叶变换就可得到 SECSY 谱。在 COSY-ESR 谱中，因很多样品中电子-电子偶极作用和化学或海森堡交换作用很弱，所以经常观测不到表示峰-峰相关的交叉峰。SECSY 谱中在一个频域轴方向上的峰是非均匀增宽的，而另一个频域轴方向上的峰则是均匀增宽的。

自旋极化 spin polarization 具体考虑共轭分子的一段 C—H 碎片。如图所示，当在碳原子的 $2p_z$ 轨道中没有电子时，两种电子组态（a）和（b）是等几率的，所以在质子上静的自旋密度为零；如果 $2p_z$ 轨道上放入一个自旋为 α 的电子后，电子组态（a）和（b）就不再是等几率的。根据 Hund 规则，在同一碳原子上，如果两个电子分别处在两个不同的轨道上，这两个电子自旋尽可能平行。所以对基态来说，组态（a）比（b）的能量低、出现的几率大，即质子上的 β 自旋就多于 α 自旋，因此在质子上产生负的自旋密度。这就是自旋极化。需注意的是自旋极化的结果在碳原子出现正自旋密度，在质子上就出现负自旋密度。



(a) (b)

还有一种自旋极化是指像化学诱导动态电子极化那样的偏离热平衡值的异常自旋布居数所产生的自旋极化。

自旋加合物 spin adduct 在自旋捕捉法中不稳定自由基与自旋捕捉剂反应生成的较稳定的自由基称之为自旋加合物。

自旋-晶格弛豫 spin-lattice relaxation 当发生磁共振时，自旋布居处于不平衡状态，为了维持共振吸收，必须通过某种方式使自旋体系能够趋于恢复平衡状态，即使高能级的粒子通过某种机制返回到低能级，以保障低能级的粒子数继续大于高能级的粒子数。在此过程中高能级的粒子数有所降低，体系总能量下降。从自旋体系在磁场中的磁化矢量来看，初始的磁化矢量顺着外磁场方向（z 轴方向，又称为纵向）为 M_0。体系受到扰动，M_0 便偏离 z 方向，一旦撤除扰动的作用，偏离了 z 轴的 M 的纵向分量便将恢复回到 M_0，此过程伴随着能量的释放。由于早期研究表明此能量传给了固体晶格（后来加以推广到周围环境）因此称为自旋-晶格弛豫（亦称纵向弛豫）。

自旋密度 spin density 自旋密度并不正好等于未偶电子密度。当分子具有未偶电子时，分子中其他电子也会受到影响，原来已成对的电子某些地方会稍具“不成对性”，其原因是电子间实际上存在着电子相关（自旋极化效应）。自旋密度的定义是某区域（或原子）处的电子自旋的总和，即

$$\rho_i = P_i(\alpha) - P_i(\beta)$$

式中，ρ_i 是分子中区域 i 上的自旋密度；$P_i(\alpha)$，$P_i(\beta)$ 是具有 α 自旋、β 自旋的电子在区域 i 上的总几率密度。当$\rho_i<0$时说明具有负的自旋密度。

自旋免疫测定法 spin immuno-assay；SIA 是通过观测因抗原抗体反应及稳定自由基的运动所引起的 ESR 信号的强度及峰宽的变化，从而对目标药物进行定性或定量分析。其基本原理是：若某种自旋标记药物和未标记药物能相互竞争地与相应抗体进行可逆结合，当先配制好一定量的抗体和一定量（比抗体多）的自旋标记药物的混合液，再加入未标记药物时，随着未标记药物的增加，与抗体相结合的自旋标记药物将脱离抗体。只要测定脱离抗体的标记药物的浓度，或测定仍未脱离抗体的标记药物的浓度，就可对未标记药物进行定量分析。

自旋膜免疫测定法 spin membrane immuno-assay；SMIA 也叫脂质体自旋免疫测定法。当连接脂的抗原（各种药物、生物物质等）溶在脂质体的双层结构，并使抗原部分突出到水相时，就可以同特异抗体相互作用。如果补体存在，特异补体产生溶胞作用，则事先被捕集在脂质体内部水相里的自旋标记物就释放出来。通过 ESR 信号的变化测试，就可以进行溶胞定量测定及血样中某种抗原含量的测定。

自旋耦合常数的符号 sign of spin coupling constant 在一般的 NMR 实验谱中不能直接决定核间耦合常数的绝对符号，只能决定相对符号。若两个耦合核具有反平行取向时，使体系的位能降低；具有平行取向时，使体系的位能升高。则这两个核间的耦合常数为正。若取向与位能关系相反，则两核耦合常数为负。两磁性核 A 与 X 经两个化学键被核 M 隔开相互耦合时，设 A 核自旋取向为正，则 A—M 键上靠近 A 核的电子取向为负，根据泡利原理，靠近 M 的电子取向应为正，M 核的取向为负。M—X 键电子靠近 M 核取向为正，靠近 X 核为负，最后 X 核取向为正。这说明 A 核与 X 核具有平行取向时最有利于体系位能降低。因此 A 与 X 核之间的耦合常数为负。通过上述分析说明，经二键的耦合常数^2J为负值，而经三键的耦合常数为正值。

自旋去耦 spin decoupling 双共振技术之一。以 AX 旋（耦合）体系为例，当以频率为 ν_X 的足够强的射频场 $\boldsymbol{B}_2$ 施加在 X 核上，同时对 A 核发射频率为 ν_A 的射频场，A 核、X 核同时发生了共振，即双共振。X$\left(I=\frac{1}{2}\right)$核的两个自旋状态 α 和 β 间不停产生跃迁和快速翻转。结果在观测与 X 耦合的 A 核的共振峰时，由于 A 核不能区分 X 核的这两种不同的状态，只能看到其平均取向，意味着 A 核与 X 核之间的耦合作用消失，A 的谱线合并为单线，这就称为自旋去耦。自旋去耦有同核去耦，对于^{1}H 核可表示为 ^{1}H{^{1}H}；也有异核去耦，如有 ^{1}H{^{19}F}，^{19}F{^{1}H}，^{13}C{^{1}H}，

$^{15}N\{^1H\}$，$^{31}P\{^1H\}$等。连续波实验的去耦方法有扫场去耦、扫频去耦方式及 INDOR 方式。脉冲傅里叶变换实验的去耦方法有选择性去耦、偏共振去耦、宽带去耦、门控去耦、反门控去耦等等。利用它可以简化图谱、从图谱的变化中找出耦合峰之间的关系，进而推断化合物分子中这些基团之间连接关系。

自旋双线 spin doublet 一组特征的 X 射线荧光光谱双线。由始态（或终态）是两个具有共同的量子数 n 和 l、而 J 相差为 1（s 各为 +1/2 和 -1/2）的能级所产生的一对谱线，其显著的特点是同一元素双线的波长相近且具有恒定的频率差，如 W 的 K_{α_1} 与 K_{α_2}、L_{β_1} 与 L_{α_2}、L_η 与 L_l、L_{γ_5} 与 L_{β_6} 等四对双线的频率差基本上相等，且与 LⅡ 和 LⅢ 的频率差一致。

自旋锁定 spin locking 在旋转坐标系中，当沿 x' 轴上施加一个 90° 脉冲 $\boldsymbol{B}_1$，使体系磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 转到 y' 轴，随即将射频场 $\boldsymbol{B}_1$ 的相位角移动（相移）90°，使 $\boldsymbol{B}_1$ 沿 y' 轴。于是 $\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{B}_1$ 平行，$\boldsymbol{M}$ 不受任何力矩（$\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{B}_1=0$）作用，意味着 $\boldsymbol{M}$ 被 $\boldsymbol{B}_1$ 锁定在 y' 轴上，这种作用称为自旋锁定。在 $\boldsymbol{B}_1$ 作用下 $\boldsymbol{M}$ 沿着 $\boldsymbol{B}_1$ 方向的弛豫类似于纵向弛豫，弛豫时间用 $T_{1\rho}$ 来表示，称为旋转坐标系中的纵向弛豫时间。

自旋探针 spin probe 用 ESR 法研究不含有顺磁物种的体系时，常采用自旋探针法。即在要研究的体系中加入适量的稳定自由基的小分子作为自旋探针，通过观测自旋探针的 ESR 谱及其变化，研究周围环境对自旋探针的影响，间接地得到有关该体系的信息。常用的自旋探针有 2，2，6，6-四甲基哌啶-N-氧基（2，2，5，5-tetramethyl-1-piperidinooxyl，TEMPO）及其衍生物等。参见**自旋标记法**条。

自旋微扰（自旋搔痒） spin tickling 一种双共振技术。当干扰射频场 $\boldsymbol{B}_2$ 强度比较小，满足 $\frac{\gamma \boldsymbol{B}_2}{2\pi} \ll J$，受 $\boldsymbol{B}_2$ 干扰的能级不仅粒子数的布居数发生变化，而且会使该能级发生分裂，从而使被观测谱也分裂的现象称为自旋微扰。谱峰分裂的大小、形状与 $\boldsymbol{B}_2$ 的强度和它的频率是否对准干扰线的中心有关。这种用 $\boldsymbol{B}_2$ 干扰图谱中某条谱线、而扫描观测其他谱线强度与形状的变化的实验称为自旋微扰法。自旋微扰的 NMR 图谱中，凡与被干扰的谱线有公共能级的谱线都分裂为双线，而无公共能级的谱线则都不发生变化。谱线的裂距与 $\boldsymbol{B}_2$ 的强度成正比，且与被干扰线的强度的平方根成正比。利用上述图线的特征，可以发现隐藏的和重叠的谱线；确定耦合常数及相对符号；找出谱线的各能量之间的关系，从而确定自旋系统的能级图。

自旋温度 spin temperature 自旋系统的粒子在两能级上布居数的差异可以定义为自旋温度 T_S

$$T_S=\frac{(E_1-E_2)}{k\ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right)}$$

式中，P_1 和 P_2 分别是低能级（E_1）和高能级（E_2）上的布居数。自旋温度和物体的温度是两个不同的概念，只有在热平衡时，自旋温度才与试样的温度一致。当外磁场恒定时，用射频场照射自旋系统，使低能级粒子跃迁到高能级上，相邻能级上布居数之差减少，虽然样品的温度没有变化，但自旋温度显著提高。T_S 用来描述系统自旋状态。

自旋系统局部场 located field of spin system 构成分子的磁性原子核实际上都是磁偶极子。核 1 的核磁矩 $\boldsymbol{M}_1$ 对离开它的中心距离为 r 处会产生磁场（局部场）应为

$$\boldsymbol{B}_{loc} = -\frac{\boldsymbol{M}_1}{r^3} + \frac{3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{M}_1 \cdot \boldsymbol{r})}{r^5}$$

由于 $\boldsymbol{B}_{loc}$ 与 r^{-3} 成正比，所以分子中指定核只需考虑与其相邻的核和电子对它所产生的 $\boldsymbol{B}_{loc}$ 的总和，称为自旋系统的局部场，它是自旋系统内部磁场。

自旋章动 spin nutation 核自旋体系在 z 轴施加静磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 外，在 x' 轴方向再施加一个相当于核拉摩频率 ω 的射频场 $\boldsymbol{B}_1$。在旋转坐标系中，核磁化强度绕 x' 轴以角频率 $\Omega = -\gamma\boldsymbol{B}_1$ 旋转。这在实验室坐标系中来看核磁化强度既绕 $\boldsymbol{B}_0$（z 轴）以 $\omega = -\gamma\boldsymbol{B}_0$ 角频率作进动，又同时绕 $\boldsymbol{B}_1$（x' 轴）以 $\Omega = -\gamma\boldsymbol{B}_1$ 角频率作进动，这种运动称为章动。自旋章动的角频率为 $|\Omega| = -\gamma|\boldsymbol{B}_1|$。$\boldsymbol{B}_1$ 脉冲作用时间 t_p（即脉冲宽度）将使磁化矢量翻转 $\theta = \gamma\boldsymbol{B}_1 t_p$，称为自旋章动角。在旋转坐标系中，射频场 $\boldsymbol{B}_1$ 对磁化矢量 $\boldsymbol{M}$ 的作用相当于一个静磁场，$\boldsymbol{M}$ 总垂直于 $\boldsymbol{B}_1$ 并处于非平衡态。在旋转坐标系中，这个磁化矢量的横向弛豫过程的时间常数记以 T_{2p}。

自旋-自旋弛豫 spin-spin relaxation 非平衡态自旋体系在恢复到平衡态的过程中，一方面以纵向弛豫释放能量给周围环境，另一方面自旋体系内部能量可以彼此交换。从核自旋体系在磁场中的磁化矢量来看，当未加横向磁场 H_1 时，在静磁场 H_0 中的自旋体系处于平衡状态，各个自旋之间的自旋磁矩 μ_x 和 μ_y 的相互关系存在杂乱无规的相位，这时的横向磁化强度 $M_\perp$ 等于零。在有外加 H_1 扰动后产生的 $M_\perp$ 将逐渐趋于平衡态，即趋于零，或者说是磁化矢量的垂直分量的进动相位由有规分布趋向无规分布，这就是自旋-自旋弛豫（亦称横向弛豫）的过程。这种横向弛豫只是失去相位相干，此时各种状态的自旋粒子总数未改变，体系的总能量也不变，也就是自旋体系与晶格（环境）之间没有能量的净流动，这一点与纵向弛豫完全不同。

自旋-自旋交换相互作用 spin-spin exchange interaction 如果体系中有两个未偶电子，由于电子是全同粒子，因此将两个电子相互对调位置后，其状态应与原体系状态不可区分。考虑到电子间存在静电排斥作用，原来四重简并的能级就会分裂为两个能级，一个是单重态，另一个是三重态。虽然引起简并解除的

原因是由于电子间的静电排斥能，但却可用一种等效的自旋哈密顿算符

$$\hat{H} = -2J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

得到同样的能级分裂。上式代表了电子自旋间的交换相互作用，J定义为电子交换相互作用常数，$2J$相当于单重态与三重态两个能级的间隔。由J的符号可确定哪个态是基态。一般，$J>0$时，基态应为三重态；而$J<0$时，基态应为单重态。J通常是各向同性的。

自旋-自旋耦合常数 spin-spin coupling constant 表示自旋-自旋偶极相互作用的大小。参看**零场分裂**条和**零场分裂参数**条、**电子与电子的偶极-偶极相互作用**条。

自氧化化学发光 auto-oxidation chemiluminescence 化学发光反应中一种化合物通过自身的氧化还原反应，可以是催化反应也可以是非催化反应，以此提高能量来激发氧化还原反应过程中生成的某一过渡中间体，当这个中间体回到基态时，以光子的形式释放能量，这种化学发光现象称为自氧化化学发光。

自由度 degree of freedom 确定物体或物体系的运动状态所需独立变量的数目。如自由运动的质点有三个移动自由度。自由度亦称变度，在已达到的平衡体系中，若改变温度、压力或浓度等可变因素而不引起该体系相数改变，这些可变因数的数目称为自由度，常以f表示。在统计计算中，自由度等于数据的总项数减去约束条件数，如若受到k个关系式的约束，则自由度$f=n-k$。当由一个总体中随机抽取容量为n的随机样本，得到n个测量值x_1，x_2，…，x_n，每一次测定都是在某范围内以概率独立取值，样本容量为n，就有n个独立自由取值的机会，自由度为n。当计算标准偏差时，由于受到计算平均值$\bar{x}$关系式$\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$的约束，在$n$个测定值中，只有$(n-1)$测量值可以自由取值，自由度$f=n-1$。在一元线性回归$a=\bar{y}-b\bar{x}$计算中，由$n$个实验点拟合回归方程，必须满足截距$a$和斜率$b$的约束条件，约束条件数为2，故自由度为$f=n-2$。在统计计算中，总自由度等于各项自由度之和，此称为自由度的加和性，它是进行方差分析的基础。

自由感应衰减信号 Free Induction Decay; FID 核自旋体系在静磁场中以圆频率ω_0作进动。一旦再受到一个以ω_0为中心的强而短的射频脉冲沿着x'轴的作用，在以ω_0为中心的一定的频宽范围内的核将发生共振，各种共振核的磁化矢量都在y'轴向产生分量$M_{y'}$。一旦停止脉冲作用，便可在y'轴向的感应线圈中检测到相应的随着时间而总体按指数衰减的共振信号，称为自由感应衰减信号，记以FID。这是一个时间域的信号。当体系存在多个共振频率的核时，各核有其特征ω_0与T_2，因此通常检测到的是各个FID的干涉图。需对FID进行傅里叶变换，将此时域信号转变成普

通容易认识的频率域信号（谱图）。

自由基（反应）产量检测磁共振 radical (reaction) -yield-detected magnetic resonance; RYDMR 见**产物产量检测电子自旋共振**条。因产物是自由基，可用 ESR 检测产物产量。

自由基对机理 radical pair mechanism; RPM 自由基对机理是解释化学诱导动态电子极化的理论之一。当化学反应过程中生成自由基时，必定生成的是三重态或单重态的自由基对。因为未偶电子间的交换相互作用，三重态和单重态的能级会不同。通常此时的交换相互作用常数 $J(r)$ 是负数，所以单重态比三重态稳定。这里的 r 是自由基对中两个未偶电子间的距离。J 随着 r 的增大而减小，三重态和单重态的能级也彼此接近。因为在强磁场中存在塞曼裂分，当 r 足够大时，单重态能级 $|S>$ 将只与三重态（$|T_{-1}>$、$|T_0>$、$|T_{+1}>$）中的 $|T_0>$ 能级发生简并。也就是说，若反应之初生成的是单重态的自由基对，因为存在扩散，成对的两个自由基相互离开，在此期间发生是 $|S>$ 与 $|T_0>$ 的混合。但当经过一段时间这两个自由基也可能再次靠近发生碰撞，这时因有 $|S>$ 与 $|T_0>$ 的混合，不是简单地恢复到单重态的自由基对，而是混入 $|T_0>$ 态，产生异常的自旋布居，其结果就是电子自旋的极化。参见 **Δg 机理**条和**超精细耦合机理**条。

自由进动信号 free precession signal 利用带有双模谐振腔的脉冲 ESR 谱仪可以观测到溶液状态下的电子自由进动的信号。双模谐振腔中同时有两个不互相耦合而互相垂直的简并模，分别耦合至输入和输出波导中。在磁共振时，由于自旋进动的结果，产生自旋感应作用，势必有一定能量从一个模转移到另一个模，输出进动信号。在溶液中，电子与核的偶极耦合作用被平均掉，观测不到核对电子进动信号调制，因而可得到自由进动信号。

自由溶液毛细管电泳 free solution capillary electrophoresis 毛细管内不含筛分介质支持物和背景电解质中不含聚合物溶液的电泳分离模式。

自准直式平面光栅装置 collimated plane grating mounting 在平面光栅光谱仪器中，为追求仪器结构简单、紧凑，可将入射狭缝和出射狭缝（或摄谱感光版）都设置在光栅的同一侧，入射光束与衍射光束在同一紧凑空间中反向行进，这种平面光栅色散系统工作方式称为自准直平面光栅装置，有时也称为 Littrow 装置。在仪器结构和使用方面，Littrow 装置有结构紧凑、仪器体积小、使用方便等优点，因此常常得到应用；但在光学性能方面，这种装置像差较大，准直镜和光谱聚焦镜的彗差相加，因此谱线成像质量不太好（如采用抛物面镜作准直镜和光谱聚焦镜时，像差可大为减小，但价格昂贵）；在杂散光方面，因出射光束与入射光束在很靠近的同一空间行进，所在镜面上入射光造成的散射光很容易直接到达出射狭

缝（或光谱感光版），此外二次衍射造成的杂散光也难以阻挡，结果造成背景强、信噪比低等缺陷。

自组膜 self assembling member; SAM 分子通过化学键相互作用自发吸附在固/液或气/液界面，形成热力学稳定的能量最低的有序膜。它将在研究界面电子转移，催化（包括生物催化）和分子识别以及构建第三代生物传感器方面具有开拓性意义。

自组装单分子膜 self-assembled monolaye rmembrane 溶液中溶解的物质常常可以吸附在固体表面。随固体基质与溶质组合方式的不同，有时可以形成高度规则的单分子膜，比如金表面由硫醇 $CH_3(CH_2)_nSH$ 形成的单分子膜中，巯基 SH 被金吸附，烷基部分紧密堆积形成二维结晶，这种分子膜称为自组装单分子膜。自组装单分子膜的制备简单，排列有序，可作为分子识别的传感器、非线性光学材料等。

自组装技术 self assembling technique 基于分子的自组装作用，在固体表面上自然地形成高度有序的单分子层的技术。

自组装膜修饰电极 self-assembly monolayer modified electrode 利用自组装技术使电极表面获得具有功能性的分子层。通常用于生物分子识别，分子器件，以及生物分子氧化还原电子传递的研究。

总分离效能指标 over-all resolution efficiency 一种定量描述混合物中相邻两组分在色谱柱中分离效能的指标，以 R' 表示。定义为相邻两峰的保留时间之差与其各自半峰宽之半的和的比值。

$$R' = \frac{2(t_{R(2)} - t_{R(1)})}{W_{\frac{1}{2}(1)} + W_{\frac{1}{2}(2)}}$$

式中，$t_{R(1)}$ 和 $t_{R(2)}$ 分别为两组分的保留时间；$W_{\frac{1}{2}(1)}$ 和 $W_{\frac{1}{2}(2)}$ 为相应组分的半峰宽。两组分保留值的差别反映了色谱热力学问题；色谱峰的宽窄反映了色谱动力学问题，R' 总括了色谱过程动力学和热力学两方面的问题。参见**分离度**条。

总交换容量 total exchange capacity 树脂上所有可交换离子均参与交换时的极限交换容量。它反映了离子交换功能基的数量。

总离子监测 total ion monitoring; TIM 也称为总离子检测(total ion detection)。是质谱法最常用的一种扫描方式。质量分析器在可能出现的质荷比范围内以固定时间间隔重复地扫描，检测系统就可连续不断的得到变化着的质谱信号。计算机一边收集存储，一边将每次扫描的离子流求和，获得总离子流。总离子流随时间变化的图谱称为总离子流图。

总离子流色谱图 total ion chromatogram; TIC 在一定质量范围内连续地重复扫描，经数据系统采集并将每次扫描检测到的全部离子强度加和，获得各次扫描对应时间变化的总离子流强度。在 GC-MS 或 LC-MS 联用中，每次扫描的总离子流强度是随色谱柱流出物浓度变化，所获得的总离子流随时间变化的图谱类似于色谱图，称

为总离子流色谱图(total ion chromatogram,TIC)。在TIC图中,纵坐标表示峰强,即总离子流强度,横坐标表示时间或连续扫描的次数。

总离子强度调节缓冲液 total ionic strength adjustment buffer; TISAB 一种用于调节、控制被测溶液体系总离子强度和pH值的混合试剂溶液。例如,用F^-离子选择性电极测定试样溶液中F^-时,为保持试样溶液的离子强度和pH恒定在适宜的范围,就需加入由柠檬酸钠配制的TISAB溶液。此时,由于柠檬酸根的掩蔽作用,还可消除试样溶液中Al^{3+}和Fe^{3+}对测定F^-的干扰。

总渗透体积 total osmotic volume 在离子排斥色谱中,中性水分子穿过Donnan膜进入树脂内溶液中,然后又返回到流动相中,与其保留时间相对应的保留体积称总渗透体积。

总体 population 又称母体。是所研究对象的全体。构成总体的一个单位,称为个体。分为无限总体和有限总体,前者所包含的个体的数目是无限的,后者所包含的个体的数目是有限的。总体具有三个基本特性:大量性、同质性和变异性。大量性是指总体必须是由许多个体所组成。同质性是指总体中各个体在某一或某些方面具有共同的性质。变异性是指总体中各个体之间在某一或某些方面存在差异性。由于总体具有上述三个基本特性,因此,在个体的行为上,呈现出波动性,在总体上,又表现出统计规律性。

总体参数 population parameter 总体分布基本特征参数。总体分布特征可用位置与形状参数描述。描述总体分布位置的参数有平均值、中位值、众数等,以表征测量值分布的集中趋势。描述总体分布形状的参数有算术平均偏差、标准(偏)差、极差等,表征测量值分布的离散性。

总体方差 population variance 表征总体分布离散性的特征数字,以σ^2表示。

$$\sigma^2=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2}{n}$$

式中,x_i是测量值;μ是总体(平)均值;n是测量值的数目。在有限次测量中,得到的算术平均值$\bar{x}$是总体(平)均值μ的一个最佳估计值。

总体(平)均值 mean of population 表示总体分布集中趋势的特征量值,以符号μ表示,是一组测定值中出现概率最大的值。对于一个特定的总体,μ是一个常数。在有限次测定中,样本的算术平均值是总体(平)均值μ的一个最佳估计值,它不仅是无偏的,而且具有最小方差。

总烃分析 total hydrocarbon analysis 在环境大气监测中所指的总烃,通常是指含碳原子数在1~8的碳氢化合物,在环境中按其反应的活性,又有两种表示方法,一种是包括甲烷在内的碳氢化合物,称总烃(THC),另一种是除甲烷以外的碳氢化合物,称非甲烷烃(NMHC)。总烃用气相色谱法测定,以FID为检

测器。当以氮气为载体测定总烃时，总烃的色谱峰中包含着氧的峰高，气样中氧产生正干扰。方法的检出限为0.14ng（以甲烷计，仪器噪声的2倍，进样量12ml）。参见**烃类气体监测方法**条。

总相关谱 total correlation spectroscopy; TOCSY 能给予一个链上所有质子彼此的全部相关信息，包括化学位移相关谱（COSY）给予的具有同碳或邻碳核自旋耦合的一般的氢的相关，也包括了RCOSY给予的沿着标量耦合自旋体系进一步的氢的相关。脉冲序列为

$$90° - t_1 - (180° - \frac{\tau_m}{4} -)_{4n-1} - 180° - \text{采集} \ \text{FID}(t_2)$$

在混合期所施加的$(180° - \frac{\tau_m}{4} -)_{4n-1}$ $- 180°$组合脉冲相当于一个强的自旋锁定场，在此期间所有自旋核好像只受到有效场B_1的作用，因此它们的化学位移的差异变得可以忽略，它们的自旋体系都变为复杂体系，从而导致沿着连接有XH_n基团的链的所有氢彼此之间出现交叉信号。设定的自旋锁定时期应比较长，以获得分子全部链接信息。本实验可用于肽、低聚糖分子的结构分析。

总效应 total effect 试验中各种因素都对试验指标产生或大或小的影响，此称为因素效应，各种因素的主效应、因素之间的交互效应以及试验误差效应的总和，称为总效应。

总悬浮物 total suspended substance 也叫总悬浮颗粒物。是悬浮在大气中的液体或微粒的总称，系指直径在100μm以下的微粒。一般指用大流量采样器，流量为1.1～1.7L·min^{-1}，超细玻璃纤维滤膜（或相似的滤膜）面积为20.3cm×25.4cm，连续采样24h，所得颗粒物的总量作为总悬浮物的日平均浓度。一般用体积浓度表示，单位为mg·m^{-3}(μg·m^{-3})。总悬浮颗粒物是大气污染常规分析指标之一，是中国《大气环境质量标准》规定的质量参数之一。

纵模 longitudinal mode 也称为轴模。它代表模的光电场沿传播方向（即共振腔轴的方向）的分布。它表示光场在光轴方向通过零值的次数，纵模数q很大，通常在表示模数时不标q值。对于每一种横模，都还存在着一系列的纵模，所以用横模和纵模的组合来表示光学共振腔的模。

纵向弛豫 longitudinal relaxation 见**自旋-晶格弛豫**条。

纵向弛豫时间 longitudinal relaxation time 一个自旋体系通过纵向弛豫而最终恢复到其平衡基态需要一定的时间。为了表征纵向弛豫过程的快慢，引入一个特征时间T_1，称为纵向弛豫时间（亦称自旋-晶格弛豫时间），其量纲为秒。T_1定义为高低两能级自旋布居数之差恢复到热平衡时的布居数差的63%（$=1-\frac{1}{e}$）所需时间。T_1越小即表示该弛豫的效率越高，恢复到平衡态越快。通常认为

体系经 $5T_1$ 时间后基本上回复到基态。对于^{13}C 核，T_1 可从 10^{-3} ~ 10^3s，所覆盖范围很宽，因此在^{13}C-NMR 谱中蕴藏着丰富的分子结构信息。参见**自旋-晶格弛豫**条。

纵向磁化 longitudinal magnetization 自旋核 k 沿磁场 z 轴的单自旋算符，记以 I_{kz}，称为自旋 k 的纵向磁化。描述核自旋系统的态随时间的演变过程可用密度算符来处理并最终求得可观测信号。而密度算符可以用角动量算符来表示。对于 $I=\frac{1}{2}$ 的核的单自旋系统的各种状态可用 3 个角动量算符 I_x，I_y，I_z 和单位算符 E 作为基算符来表示。二自旋（kl）系统的各种状态可由单自旋基算符的直积为基算符来表示，有 16 个积算符构成正交完备基算符。它们是：$\left(\frac{1}{2}\right)E$；$I_{kx}$，$I_{ky}$，$I_{kz}$，$I_{lx}$，$I_{ly}$，$I_{lz}$；$2I_{kx}I_{lz}$，$2I_{kx}I_{ly}$，$2I_{kx}I_{lx}$，$2I_{ky}I_{lz}$，$2I_{ky}I_{ly}$，$2I_{ky}I_{lx}$，$2I_{kz}I_{lx}$，$2I_{kz}I_{ly}$，$2I_{kz}I_{lz}$。其中单自旋算符 I_{kz} 为自旋 k 的纵向磁化，I_{kx}，I_{ky} 分别为自旋 k 的同相 x 磁化与同相 y 磁化。二自旋积算符中，$2I_{kx}I_{lz}$，$2I_{ky}I_{lz}$ 分别为自旋 k 关于自旋 l 的反相 x 磁化与反相 y 磁化。$2I_{kx}I_{lx}$，$2I_{ky}I_{ly}$，$2I_{kx}I_{ly}$ 与 $2I_{ky}I_{lx}$ 为自旋 k 与 l 的二自旋相干。$2I_{kz}I_{lz}$ 为自旋 k 与 l 的纵向二自旋排列。简单的积算符不表示纯 p 阶量子相干。纯 p 阶量子相干将由它们的线性组合表示。

纵向检测电子自旋回波包络线调制 longitudinal detected electron spin echo envelope modulation；LOD-ESEEM 是 LOD-PESR 的一种，即检测纵向磁化强度 M_z 快速变化的 ESEEM。测量 LOD-ESEEM 时使用三脉冲序列 $\left(\frac{\pi}{2}-\tau-\pi-\tau-\frac{\pi}{2}\right)$，所得到的谱图与常规的双脉冲 ESEEM 谱相同。但因无死时间影响检测，LOD-ESEEM 的数据采集可以比常规的双脉冲 ESEEM 早很多，适用于检测和研究短寿命顺磁物种、非常短的相位记忆时间、核调制情况等。

纵向检测脉冲电子自旋共振 longitudinal detection-pulsed ESR；LOD-PESR 纵向检测脉冲电子自旋共振就是在短的脉冲（脉冲宽度 $t_p < T_1$，T_2，和翻转角度 $\omega_1 t_p \leqslant \pi$）作用下，检测纵向磁化强度 M_z 的快速变化。因为检测不受微波脉冲的干扰，所以激发和检测可同时进行。其结果是不存在微波脉冲后的死时间，与通常的脉冲 ESR 测试相比可以在激发后经过很短的延迟时间就能开始数据采集。重复单 π 脉冲序列的 LOD-PESR 可测无畸变扫场 ESR 谱，适用于检测短寿命顺磁物种，并确定其寿命。重复双脉冲 π-τ-π 序列的 LOD-PESR 用于测定纵向弛豫时间。参见**纵向检测电子自旋回波包络线调制**条。

纵向扩散 longitudinal diffusion 又称轴向扩散。在色谱过程中，样品从柱头加入后，组分的谱带在色谱柱内运行时沿柱轴方向的扩散效应，此扩散效应包括为涡流扩散与分子扩散。参见**涡流扩散**条与**分子扩散**条。

足印法 footprinting 一种鉴定被DNA结合蛋白或RNA结合蛋白的核酸序列的技术。

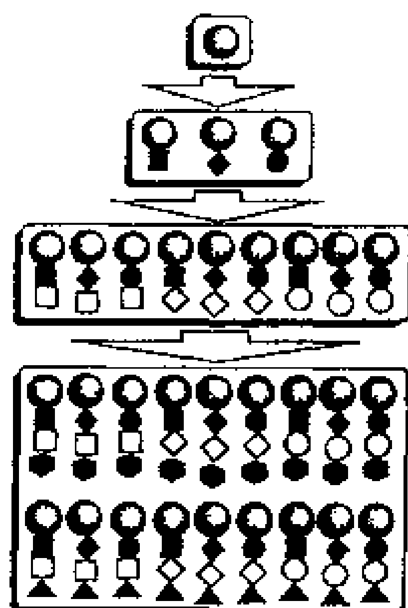
阻遏作用 repressing 由于阻遏蛋白结合在mRNA或DNA的特异位点而抑制基因转录或翻译的现象。由于阻遏作用，某些特异性酶的合成被阻止。

阻抑动力学光度法 inhibition kinetic-spectrophotometry 一类利用某种组分对某催化显色反应速率的阻抑作用，基于吸光度的变化测定该组分的光度分析方法。例如，Fe^{3+}能催化H_2O_2氧化中性红而使其褪色的反应，而苯二酚能抑制这个催化反应的进行，因而能在一定条件下测定苯二酚。

组合单位 compound unit 由多于1个单位通过数字形式构成的单位。如焦耳每开尔文（$J \cdot K^{-1}$），米^2（m^2）都是组合单位。

组合导数分光光度法 combined derivative spectrophotometry 是以双波长K系数法作为多组分同时测定的数学模型，用于解析不同阶次导数光谱数据的一种分光光度法。本法一般先取三个测量波长，通过波谱导数间的组合并引入系数K，从而消除干扰组分的影响。该法能应用于两种组分的同时测定，一般采用双光束双波长分光光度计完成测定。

组合化学 combinatorial chemistry 该词起因于1963年Merrifield提出的肽的固相合成。通过将肽结合在固体上，随后的反应、后处理操作变得非常容易，可以方便地接上保护基、缩合剂等进行自动合成。20世纪90年代正式提出了组合化学的概念，即：组合化学是通过数种分子单元的组合，同时合成多种类化合物并进行评价的化学技术。如下图所示，表示通过多个结构单元（building block）的组合同时合成多个化合物。组合化学在制药产业、分子识别、催化剂开发等均有重要应用。



组合脉冲 composite pulse 实验中的单脉冲总不可能是理想的完善的，表现为：脉冲宽度不准确；有一定宽度的脉冲上沿和下沿；相移误差；偏共振效应，射频场空间分布不均匀等。如果采用由一串单脉冲脉冲按一定顺序组合起来的组合脉冲，便可通过它们的组合后的集体作用克服单个脉冲的不完善性，使其总体效果达到理想化。常用的有：组合90°脉冲，组合180°脉冲、组合Z脉冲，组合去耦脉冲，MLEV组合脉冲序

列，WALTZ 脉冲序列、DANTE 脉冲序列，Redfield 脉冲序列等。

组合式仪器系统　building block instrument　又称积木式仪器系统。先将仪器的各主要功能部分制造成一个个独立的单元组件，然后将它们组合在一起构成一个完整的仪器系统。如目前使用的液相色谱仪是由高压输液泵、脱气装置、柱温箱、检测器和数据处理系统等几个单元组件组合而成的，其最大的好处是可以根据实际的需要配置、更换和添加适当的组件。

组距　class interval　在大量测量数据的统计分布分析中，将测量数据分组以后各组数据所跨的区间。组距的终端值称为组限值，一组数据里的最大值和最小值，分别称为该数组的上限值和下限值。在分组时，以等距分组为好。组距 x_i 的大小可根据斯特奇斯（H. A. Sturges）公式计算。

$$x_i = \frac{R}{1 + 3.322\log n}$$

式中，R 是最大值与最小值之差；n 是数据的数目。

组凝集反应　group agglutination reaction　用组特异性（与种特异性相对）抗原的对应抗体所做的细菌凝集。

组频谱带　combination band　又称合频谱带，可分为和频谱带与差频谱带。和频谱带是指同时从基态激发两个（或更多）振动 ν_i 和 ν_k 所产生的一个频率为 $\nu_i + \nu_k$ 的吸收谱带，差频谱带是由两个基频之差产生的频率为 $\nu_k - \nu_i$ 的吸收谱带。还可能有 $\nu_i + \nu_j - \nu_k$ 或 $2\nu_i + \nu_j - \nu_k$ 这类混频谱带。组频谱带是由于振动的非谐振性引起的，其强度和泛频谱带的差不多，而较基频谱带弱得多。

组试剂　group reagent　无机定性系统分析法所用的一个术语。为缩小鉴定范围，系统分析法首先利用某些离子的共性（如沉淀性质），用几种试剂将试样溶液中的离子归于数个大组，每个大组又分几个小组，每个小组仅可能有数种元素离子，以便鉴定。这些用于分组的试剂称为组试剂。最常利用沉淀性质的组试剂有氯化物、硫酸盐，硫化氢，硫化铵，氢氧化钠等。利用一定条件下，试样溶液中各元素离子与这些组试剂反应生成的产物的溶解度的相似性或差异，被分成不同的组。例如，能形成难溶氯化物沉淀的仅可能是 Ag^+，Pb^{2+}，Hg^+ 等少数离子，若试样溶液与可溶性氯化物反应出现白色沉淀，则预示着试样溶液中含有这些离子的全部或部分，再经进一步的鉴定即可得到正确的分析结果。

50%组织培养感染量　50% tissue culture infective dose　使半数组织培养物遭受感染、发生病变的病毒剂量。

组织相容性试验　histocompatibility test　测定移植受者和供者之间组织相容性的各种试验。如组织配对试验、组织定型试验等。以此选择最适当的配对的供者和受者进行器官移植。

组织型纤溶酶原激活物测定　de-

termination of tissue plasminogen activator 组织型纤溶酶原激活物（t-PA）是由血管内皮细胞及各种组织产生的。它是一种丝氨酸蛋白水解酶，分子量6.6～7.2万。对纤维蛋白的亲和力高，在血液凝固时游离的t-PA结合在血凝块上，从而使其活性增强，能有效的激活血凝块中的纤溶酶原，从而溶解血栓。用发色底物S2390或S2251等可以测定t-PA的活性；用t-PA抗血清和免疫法可以测定t-PA的抗原含量。正常参考值分别为（1.94±0.72）IU・ml^{-1}和（8.33±3.99）μg・L^{-1}。血浆t-PA水平的高低反映纤溶活力的强弱。

最大采样频率 maximum sampling frequency 最大采样频率（S_{max}）是指在单位时间内所能完成的测定周期数（t_{cyc}指测量周期长，即在基线上的峰宽），通常按小时计，即$S_{max}=\frac{60}{t_{cyc}}$，采样频率是$S_{1/2}$和反应器体积（$V_r$）的函数，$S_{1/2}$指达到50%稳态信号所需的样品体积。因此，系统设计得具有最小的$S_{1/2}$、尽可能小的样品体积（S_v）和最小的分散因子（$\beta_{1/2}$）是获得最大采样频率的关键。

最大残留限量 maximum residue limit；MRL 又称最高残留限量。在食品和农畜产品中农药残留的法定最高允许的浓度，以每千克鲜重农畜产品中农药残留的毫克数表示（mg・kg^{-1}）。在生产或保护商品过程中，按照良好的农业生产规范，直接或间接使用农药后，导致在各种和饲料中形成的农药残留物的最大浓度，定为最高残留限量。按照农药的毒理学评价对所制定的MRL，经测算每日从饮食中摄入的总农药残留量是否超过农药的每日允许摄入量，以此来评定MRL的安全性。制定最高残留限量的首要目的是用于国际贸易，经国际机构和各国立法或行政部门所规定的最高残留限量具有法规性，国际法典MRL具有推荐性。

制定最高残留限量最先是为了应用于国际贸易，由JMPR按下列程序评定。首先根据农药及其残留的毒性评价，按照国家颁布的良好农业措施（GAP）或安全合理使用农药规范，适应本国各种病虫害的防治需要，在严密的技术监督下，在有效防治病虫害的前提下和在取得的一系列残留量数据中取得代表性的较高数值，定为最高残留限量，提交CCPR大会上经各国政府代表审议后审定为国际法典MRL，各国所定MRL是经各国政府从残留试验中所得的残留量值来评定本国的MRL。

最大功率升温 maximum power temperature program 石墨炉原子吸收光谱分析中的一种快速升温技术。在极短的时间内用最大的功率将石墨炉的温度提高到最终的原子化温度，使被测元素的原子化脉冲全部或大部分出现在原子化温度-时间曲线的等温部分，以改善原子吸收分析特性。

最大隶属度原则 maximum membership principle 在模糊聚类时以隶属度最大来决定所研究对象的归属。

设有 n 个模糊子集 $\underset{\sim}{A}_1$，$\underset{\sim}{A}_2$，…，$\underset{\sim}{A}_n$，要对某一对象 u_0 归类，若隶属度 $\mu_{\underset{\sim}{A}_i}(\mu_0) = \max[\mu_{\underset{\sim}{A}_1}(\mu_0), \mu_{\underset{\sim}{A}_2}(\mu_0), \cdots, \mu_{\underset{\sim}{A}_n}(\mu_0)]$，则将 u_0 归属于 $\underset{\sim}{A}_i$ 类。如在地表环境水质评价中，分为1、2、3、4、5共五个级别，根据八项监测指标用模糊数学方法计算出各自的隶属度相应分别为0.250，0.255，0.115、0、0，按照最大隶属度原则，具有最大隶属度的水质级别，即为地表水所属的水质级别，因此，将地表水水质判为2级偏1级。

最大熵法　maximum entropy method; MEM　与傅里叶变换相同，是将时间域的谱转换成频率域谱的方法之一。其基本原理是取一组时间序列，使其自相关函数与一组已知数据的自相关函数相同，同时使已知自相关函数以外的部分的随机性最强，以所取时间序列的谱作为已知数据的谱估值。它等效于根据使随机过程的熵为最大的原则，利用 N 个已知的自相关函数值来外推其他未知的自相关函数值所得到的频率谱。一般不知道自相关函数，而是利用有限个时间信号序列通过递推算法得到频率谱。最大熵法是一种可获得高分辨率的非线性谱的估算方法，特别适用于数据长度较短的情况。

最大吸收波长　maximum absorption wavelength　吸收曲线上最大吸收峰所对应的波长，常以 λ_{max}（nm）表示，是某种吸光物质的特征参数。吸（分）光光度法中常用 λ_{max} 作测定该吸光物质的测定波长（灵敏度高，并可减少因入射光的非单色性引起的误差）。

最低抑制浓度测定法　determination of minimum inhibitory concentration　通过测定能完全抑制病菌生长的药剂最低浓度，来衡量药剂毒力的杀菌剂生物测定方法。通常是在液体或固体培养基中加入一系列不同浓度的药液后接种病原菌，经过定温培养，观察病菌生长情况，确定完全抑制病菌生长所需的最低药剂浓度。测定方法有：（1）液体培养基稀释法，多采用试管系列稀释法，将定量液体培养基分别加入经过消毒的试管中，然后在各试管中加入定量孢子悬浮液，在定温下培养一定时间后，找出抑制病菌生长的最低药剂浓度，以此比较药剂毒力；（2）固体培养基稀释法，将一系列不同浓度的药液与定量的融化培养基混合，分别倒入灭菌培养皿内，然后接种、定温，一定时间后观察病菌生长情况，找出抑制病菌生长的最低药剂浓度。

最后线　persistent line　当试样中某元素的含量逐渐降低时，光谱中该元素的谱线强度随之相继减弱，能观察到谱线数目也就相继减少。最后，当元素含量降到很低时，该元素的大部分谱线已在光谱中消失，只剩下一条或几条谱线。而在元素含量进一步降低时，这些谱线才最后消失。这些

谱线就称为该元素的最后线。共振线大部分属于最后线。定性分析时利用各元素的最后线来判断低含量元素是否在试样中存在。

最佳流速 optimum flow rate 在速率方程中（参见范第姆特方程条）对应最小塔板高度的流速，也即分离效率最高时的载气流速，以 u_{opt} 表示。最佳流速与组分的容量因子 k' 值有关，因此在分析中应针对"最难分离物质对"来选择最佳流速。对应于某一物质的 u_{opt}，可通过在不同的载气流速 u 下测得的板高 h 对流速作图，得到 h-u 的双曲线关系，曲线最低点处对应板高最小的流速即为最佳流速。

最佳倾倒角 optimum flip angle PFT-NMR 实验中，若一次扫描要获得最大信号，应取 90° 脉冲。但多次扫描进行累加时，应设定足够长的时间间隔，所有核都恢复到初始平衡态，以便使下一次脉冲作用后能获得最大的信号。为了在有限实验时间内更有效地获取最大稳态 NMR 信息，实验中应采用最佳倾倒角 θ_E，常称为 Ernst 角。化学环境不同的核有不同的弛豫时间，各有一个最佳倾倒角。有关系式：$\cos\theta_E = \exp\left(\frac{t_H}{T_1}\right)$，式中，$t_H$ 为两次射频激发脉冲之间的间隔时间；T_1 为被测核的自旋晶格弛豫时间。实验时应取其中 T_1 最长的核的相应的 θ_E 为宜。

最佳实际流速 optimum practical flow rate 又称最佳工作流速。是指在最佳流速的基础上，为提高分析速度而实际采用的高于最佳流速的载气流速。参见**工作流速**条。

最佳透光率 optimum transmission 在进行红外光谱定量分析时，其分析的准确度依赖于透光率 T 的测量精度。T 值太大或太小都会使分析结果的误差增大。按照透光率 T 测量误差分布曲线，$T = 37\%$ 时，测量的相对误差为最小，此为最佳透光率。在实际工作中，将透光率控制在 25% ~ 50% 范围内，将获得较好的测定精度。为此需要调节吸收池厚度或样品浓度，使分析谱带的透光度控制在此范围内。

最佳无偏估计值 best unbiased estimator 多个不同的无偏估计值中具有最小方差的无偏估计值。从实际应用的考虑出发，多次测量的平均值 $\bar{x}$ 的精密度优于单次测量值 x，因此，用 $\bar{x}$ 比用 x 估计总体平均值 μ 更有效更优越。

最小残差法 minimum residual method 一种判断试验点是否为异常点的方法。残差 $\delta = y_i - Y_i$ 遵从正态分布 $N(0,\sigma^2)$，其中 y_i 与 Y_i 分别是浓度为 x_i 时的实验响应值与按回归线计算的响应值。标准化残差 $\delta' = \delta/\sigma$ 遵从标准正态分布 $N(0,1)$，σ 是总体标准偏差。根据标准正态分布表，概率 $p = (|\delta| \leq 2) = 0.9545$，即实验点标准化残差落在（$-2$，2）区间外的概率 < 0.5，是一个小概率事件，因此，可将 $|\delta'| > 2$ 的实验点作为异常点删除。

最小点火能 minimum ignition energy 也称为最小火花引燃能或临界点火能。是使可燃气体与空气的混合物起火所必需的临界能量值。它是表达易燃易爆物爆炸危险的重要参数，如果引燃源的能量低于这个临界值，则不能使可燃物着火。

最小二乘法 method of least square 一种广泛应用的拟合因变量 y 与自变量 x 函数关系的方法。根据一组对应的测量值 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$，基于使偏差平方和 $\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2$ 达到极小的原理（式中 y_i 与 Y_i 分别为对应于自变量 x_i 的测量值与计算值），对函数的参数进行估计，找出表征 y 对 x 的函数关系 $y=f(x)$。在分析测试中，用该法来建立标准工作曲线。

最小二乘估计 least square estimation 一种参数估计方法。基于使偏差平方和达到极小的原理，对函数的参数如平均值标准偏差进行估计，以获得最佳的估计值。

最小二乘拟合 least square fitting 基于使偏差平方和达到极小的原理，根据若干个对应的数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ 对函数的参数进行估计，以找出一个已知函数的方法。在分析测试中，它是建立校正曲线的基础。

最小检测量 minimum detectable quantity 又称最小检出量。是指能产生相当于2倍检测器噪声信号时所需的最小进样量。最小检测量的表达式为 $Q_0 = 1.065 W_{\frac{1}{2}} \cdot D$，式中，$W_{\frac{1}{2}}$ 为半峰宽；D 为检测限。从公式中可看出，当色谱柱效高半峰宽变小时，Q_0 值也变小。参见**半峰宽**条与**检测器检测限**条。

最小检测浓度 minimum detectable concentration 又称最小检出浓度。在柱容量所允许的最大进样量的条件下，检测器所能检测出的最低浓度，或将最小检测量和进样量（体积或质量）的比值作为最小检测浓度。

最小偏向角 minimum deviation angle 某一波长的入射光线被光谱色散棱镜折射后，其出射光线方向与入射方向之间的夹角称为偏向角。不同波长的光线以同样入射角投射到同一色散棱镜上，其偏向角不同。对已制成的棱镜和确定波长的入射光线，其偏向角与入射角大小相关；而且当入射角等于某一确定值时，偏向角值达到最小值，这时光线从棱镜出射时的出射角等于其入射角，光线在棱镜内部平行于棱镜底面对称通过棱镜。这个偏向角最小值称为最小偏向角，显然不同波长的入射光在同一棱镜上的最小偏向角数值不同。在棱镜光谱仪中，设计时都将最关心的工作波长值（例如工作波长范围的“中间波长”或分析工作最关心的某个特征波长）作为设计基准，使色散棱镜系统安置位置对此波长处于最小偏向角工作状态，这将在仪器结构对称、紧凑、系统误差降低、不产生

附加横向放大率等等方面得到最佳效果。

最小显著性差异 least significant difference 在检验两平均值之间是否有显著性差异时，如果两平均值之差 $d \leqslant t_{\alpha,f} S_d$，则在显著性水平 α 和自由度 f 时判两者没有显著性差异；反之，若 $d > t_{\alpha,f} S_d$，则判两者有显著性差异。其中 S_d 是两平均值差值的标准偏差。$d = t_{\alpha,f} S_d$ 是统计判断两平均值有显著性差异时的最小差值，因此，将具有最小差值的显著性差异称为最小显著性差异。

最小抑菌浓度 minimal inhibitory concentration；MIC 定量测定抗菌药物抑制细菌生长作用的体外方法称为稀释法。可分为肉汤稀释法和琼脂稀释法。稀释法所得的某抗菌药物能抑制检测菌肉眼可见生长最低浓度，称为最小抑菌浓度。

最小致死量 minimum lethal dose；MLD 测定毒物毒力剂量的一种方法，即一定条件下足以使动物死亡的最小毒物量。不同剂量毒物经一定途径分别注射在一组体重相同的动物，然后在一定时间内观察完全杀死动物的最小剂量，即最小致死量。

最优抽样比 optimum sampling fraction 抽样误差最小、抽样经费最省的抽样比。抽样误差随抽样量增大而减小，而抽样经费随抽样量增加而增大，二者是相互制约的。在实施抽样时，合理的做法是，在给定抽样误差的条件下，尽量使抽样经费最省，或者在给定抽样经费的条件下，使抽样误差最小。

最优估计 optimal estimation 一种参数估计方法。一个参数可有多个无偏估计量，能获得具有最小方差的无偏估计量的估计方法。用样本值来估计总体平均值 μ 和总体方差 σ^2，用不同估计方法所得到的估计值是不同的，评价估计值优劣的标准是一致性、无偏性、有效性和充分性。一致性是指随着样本容量增大，估计值越接近于待估参数，当样本容量趋于无穷大时，估计值依概率收敛于总体参数。无偏性是指用估计值估计待估参数不存在系统误差，估计值在待估参数附近波动。有效性是指用方差最小的估计值估计待估参数最有效。充分性是指充分利用了样本信息的估计值去估计待估参数效果最好。一个参数可有多个估计量，在这多个估计量中，具有最小方差的无偏估计量是最佳估计量。如样本平均值 $\bar{x}$ 和样本方差 S^2 是利用了全部样本信息的估计值，它们分别是总体平均值 μ 和总体方差 σ^2 的最佳估计量，而中位值 $\tilde{x}$ 和极差 R 只是利用了极少量的样本信息，不是总体平均值和总体方差的最佳估计量。

最优试验设计 optimal design of experiment 在各种可能的试验设计中，获得试验指标最佳、试验工作量最小、费用最省的试验设计。

最优值 optimal value 在优化过

程中所有可能得到的各种量值中的最佳值。

佐剂 adjuvant 能够非特异性增强对抗原免疫应答的物质，本身无抗原性，但与抗原混合可促进抗体的产生。佐剂可在注射抗原前、后给予。它既能在少量抗原存在下促进抗体产生，也能延长抗体产生的时间，还能产生炎症反应，使抗体形成细胞局部汇集。

其他

A底心格子 A-centered lattice 在单斜和正交晶系中可能出现的复格子。其特点是：平行六面体单位格子（晶胞）中，不平行于晶体学 a 轴的一对平面的面中心处存在着附加点阵点。每个 A 底心晶胞中含有两个点阵点。

AA'BB'系统 AA'BB' system 是由化学位移差别相当小的两组核，而各组都包含有两个磁不等价的核构成的四核强耦合自旋体系。AA'BB'系统的 NMR 谱图呈左右对称。A 有 14 条，B 有 14 条。总体像 A_2B_2 系统，但谱线数目要多得多。对称二取代的苯环，包括相同基团的邻位取代和不同基团的对位取代的体系以及许多分子中的 $>CH_2—CH_2<$ 基团都可能形成 AA'BB'系统。邻二氯苯是典型例子，它的强度较低的外侧线的半高宽常作为 NMR 谱仪分辨率指标好坏或工作状态好坏的参数。

AA'XX'系统 AA'XX' system 由化学位移差别较大的两组核，而各组都包含有两个磁不等价的核构成的四核弱耦合自旋体系。该系统 NMR 谱图可分为完全相同的两部分 AA'和 XX'部分。每部分都有 12 条谱线，而且左右对称，它们的对称中心位置分别是 ν_A 和 ν_X。该体系的耦合常数

有4个独立的参数：$J_{AA'}$、$J_{XX'}$、J_{AX} 及 $J_{AX'}$。二氟代乙烯 $C_2H_2F_2$ 的3种可能的分子异构体1,1-二氟乙烯，顺-二氟乙烯和反-二氟乙烯都是典型的AA'XX'系统。此时AA'部分的谱图在氢谱，XX'部分在氟谱。

AB 系统（体系） AB system AB双核强耦合自旋系统（体系）的简称。$\Delta\delta$ 与 J_{AB} 在同一数量级时的双核自旋体系。它是 A_2 体系向AX体系的过渡。对 $I=\frac{1}{2}$ 核AB系统有4条线，其中A和B各占两条，这两线间距离等于耦合常数 J_{AB}。与AX系统不同的是AB系统的4条线高度不等，内侧两线高于外侧两线，不能相互交叉。A与B的化学位移 δ_A 与 δ_B 已不在所属二线的中心，需要按重心原理经计算才能求出。对于AB体系的4条线自左到右顺次编号为峰1、峰2、峰3、峰4。用 [1~2]，[2~3]，[3~4]，[1~4] 表示1、2两峰，2、3两峰，3、4两峰与1、4两峰间的距离，I_1、I_2、I_3、I_4 分别表示峰1、2、3、4的强度。

AB_2 系统 AB_2 system 三核强耦合自旋体系。它的NMR谱是 A_3 体系与 AX_2 体系的过渡体系，应观测到9条谱线，A部分4条，B部分4条互不交叉，另一条强度很弱，甚至不易观测到，是综合峰。A部分谱线强度较弱且分布较稀疏，而B部分谱线较强且较密集。多数情况下居中有一强峰，往往是两个B峰的重叠。若 $\nu_A > \nu_B$，并将它依次从A到B编号 ν_{1-9}。则谱线有下列规律 $\nu_1-\nu_2=\nu_3-\nu_4=\nu_6-\nu_7$；$\nu_1-\nu_3=\nu_2-\nu_4=\nu_5-\nu_8$；$\nu_3-\nu_5=\nu_4-\nu_7=\nu_8-\nu_9$。化学位移及耦合常数可根据下面的公式得到：$\nu_A=\nu_3, \nu_B=\frac{(\nu_5-\nu_7)}{2}, J_{AB}=[(\nu_1-\nu_4)+(\nu_6-\nu_8)]$。

A_2B_2 系统 A_2B_2 system 四核强耦合自旋体系。它的NMR谱应由18条谱线组成，对称分布，中心是 $\frac{(\nu_A+\nu_B)}{2}$，它有4条综合峰，强度很低，因此常观察到14条，A，B各占7条。

ABC 系统 ABC system 是化学位移极其相近而耦合常数又相当大的三核强耦合自旋体系。它的NMR谱图是三核自旋体系中最复杂的，它应有15条谱峰，有3条峰为综合峰，强度太弱，有时看不到。它是AMX、ABX系统向 A_3 系统（单峰）的过渡系统。在ABC系统中，也可找到三组四重峰，共有3种裂距，每种裂距都重复出现4次，但都不等于它们之间的耦合常数 J_{AB}、J_{BC}、J_{AC}，它们的化学位移也不能从谱图上直接读出，分析时需作复杂的计算。通常图谱谱线的强度分布是中间高，两侧低。

ABX 系统（体系） ABX system 一种三核自旋体系，其中AB两核是强耦合体系，而A、B与X之间都是弱耦合体系。可看做AMX系统中有化学位移较近的两个核所构成。在AB部分可以找到裂距为 J_{AB} 的四对峰，并可分解成AB系统的四重峰两

组，它们各自的中心记以 P、Q。两个中心的间距是 $\frac{(J_{AB}+J_{BX})}{2}$。这两中心离四甲基硅 TMS 的距离之和为 A、B 两核的化学位移之和即（$\nu_A+\nu_B$）。X 部分理论上有六条峰，左右对称分布，其中有两条强度低、是混合跃迁所产生。很多情况下，强度比较大的等高的峰的间距为（$J_{AX}+J_{BX}$），X 谱峰的对称中心位置是 δ_X。通过所有谱线的分析可解得三核的化学位移与 J_{AB}、J_{AX}、J_{BX} 的绝对值及其相对符号。

AMX 系统（体系） AMX system AMX 三核弱耦合自旋系统（体系）的简称。对 $I=\frac{1}{2}$核，该系统有 12 条谱线。A、M、X 核各有 4 条，强度皆相等，分属 3 个区，每组峰的中心恰是各核的化学位移。12 条线只有 3 种裂距，J_{AM}，J_{MX} 及 J_{AX}。对于 A 核的 4 条谱线可找到 J_{AX} 及 J_{AM}，M 核的一组线可找到 J_{MX} 与 J_{AM}，而 X 核一组谱线可找到 J_{AX} 与 J_{MX}。

API 度 API gravity 美国石油学会（American petroleum institute, API）制订的一种量度，用以表示原油及石油产品密度。API 度愈大，相对密度愈小，即原油越轻，价格越高。其值以下式计算

$$\text{API 度}(15.6℃)=\frac{141.5}{\text{相对密度}(15.6℃)}-131.5$$

AX 系统（体系） AX system AX 双核弱耦合自旋体系的简称。对于 $I=\frac{1}{2}$核，它的谱图有 4 条强度相等的谱线组成。A 及 X 各有两条谱线，分别位于谱图的偏左侧和偏右侧。各自的两条谱线的间距等于耦合常数 J_{AX}，强度比 1:1。它们中心位置是各自的化学位移，它们之间距是 AX 两核的化学位移之差：$\Delta\delta=\delta_X-\delta_A$。

A_2X 系统（体系） A_2X system A_2X 三核弱耦合自旋系统（体系）的简称。对于 $I=\frac{1}{2}$核，该系统的谱图中有 5 条线，其中 X 有 3 条线，强度比为 1:2:1；A 有两条线，强度为 4:4。三重峰的裂距等于双峰的裂距，就等于它们之间的耦合常数 J_{AX}，各组峰的中心处为各自的化学位移。

A_2X_2 系统（体系） A_2X_2 system A_2X_2 四核弱耦合自旋系统（体系）的简称。对于 $I=\frac{1}{2}$核，该系统谱图有六条线，A 和 X 各占 3 条。它们的强度比都为 1:2:1。可以从图上直接读出它们的化学位移——三重峰居中峰的峰位，并直接读出它们的耦合常数 J_{AX}——三重峰的裂距。

A_3X 系统（体系） A_3X system A_3X 四核弱耦合自旋系统（体系）的简称。对于 $I=\frac{1}{2}$核该系统谱图有六条线，其中 X 有 4 条线，强度比为 1:3:3:1；A 有两条线，强度为 8:8。四重峰的裂距等于双峰的裂距，就等于它们之间的耦合常数 J_{AX}，各组峰的中心处为各自

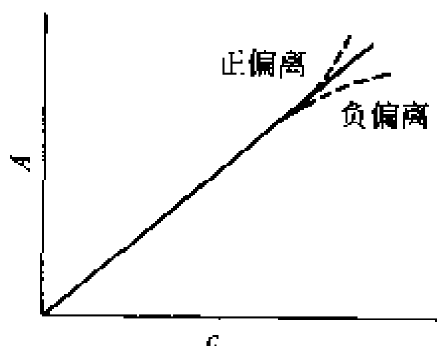
的化学位移。

Beer 定律 Beer's law 1852 年 Beer 指出，当单色光通过液层厚度一定、均匀的吸收溶液时，该溶液对光的吸收程度与溶液中吸光物质的浓度成正比。这种关系称为比耳定律，其数学表达式为

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = Kc$$

式中，A 称为吸光度；I_0 和 I 分别为入射光和透射光的强度；c 为吸光物质的浓度；K 为比例常数。Beer 定律是最重要、应用最广泛的光吸收定律，适用于所有电磁辐射和所有吸收物质，是吸收光谱定量分析的基本关系式。Beer 定律实际是朗伯-比耳定律（参见**朗伯-比耳定律**条）在液层厚度一定时的特定表达式。

Beer 定律的偏离 deviations from Beer's law 根据比耳（Beer）定律，当波长和强度一定的入射光通过液层厚度一定的溶液时，吸光度 A 和吸光物质的浓度 c 成正比，即 A-c 关系图形呈直线，但在实际工作中，A-c 图形的两端呈现弯曲，这种现象称为对比耳定律的偏离。这种偏离又分为正



偏离和负偏离（参见左图）。引起这种偏离的因素很多，大致可分为物理性因素（包括入射光的非单色性、杂散光、单色器内的内反射等）和化学性因素（包括吸光物质因离解、缔合和溶剂化作用等引起存在型体的改变，而同一物质不同存在型体对光的吸收特性不同）。

Benesi-Hildbrand 方程 Benesi-Hildbrand equation 简称 B-H 方程。用以计算络合反应、酸碱反应、二聚体生成、主-客体反应等的结合常数。若反应物 A（分析浓度 c_A）与反应物 B（分析浓度 c_B）按 1∶1 生成 C。光路长为 $b$cm，波长 λ 下测得的吸光度为 D，各组分的摩尔吸光系数分别以 ε_A，ε_B，ε_C 表示，并令 $d = D/b$ 时，B-H 方程的表达式为 $\frac{c_A}{d} = \frac{1}{c_B K \varepsilon_C} + \frac{1}{\varepsilon_C}$。此方程只适用于 A 和 B 都无吸收的情况。若 B 在 λ 处几乎无吸收（$\varepsilon_B \approx 0$）而 A 有吸收，且 $c_B \gg c_A$ 或 K 值较大，则 B-H 方程变为 $\frac{c_A}{d - d_0} = \frac{1}{c_B K(\varepsilon_C - \varepsilon_A)} + \frac{1}{\varepsilon_C - \varepsilon_A}$，此称为扩充的 B-H 方程。以 $c_A/(d - d_0)$ 对 $1/c_B$ 或 c_A/d 对 $1/c_B$ 作图得一直线，由直线斜率及截距可求得 K。通过推导，B-H 方程也适合用荧光法、核磁共振法测定平衡常数。

Bertrand 法 Bertrand method 一种测定还原糖含量（质量百分数）的方法。样品用水或乙醇溶液提取，澄清

液与过量的碱性酒石酸铜溶液反应，加热至沸腾 2min，获得氧化亚铜沉淀，加入过量酸性硫酸铁溶解，用高锰酸钾回滴亚铁盐，计算得氧化亚铜的量。查高锰酸钾-糖类检索表，由公式即可计算出试样中还原糖的含量。

$$\text{还原糖含量} = \frac{A}{m \times \frac{V_2}{V_1} \times 1000} \times 100\%$$

式中，A 为由氧化铜的量从高锰酸钾糖类检索表查得的还原糖量，mg；m 为样品质量，g；V_1 为样品提取液总体积，ml；V_2 为测定时使用样品提取液的体积，ml。

Bjerrum 函数　Bjerrum function　亦称为配（络）合物的形成函数 $\bar{n}$。参见**形成常数**条。

Bloch-Siegert 效应　Bloch-Siegert effect　在去耦实验中，对于 AX 体系，若去耦幅照射频 $\nu_2 = \nu_X$，且 $\frac{\gamma B_2}{2\pi} \ll |\nu_A - \nu_X|$，这时 ν_A 和 ν_X 处的观察频率不受 B_2 的影响。当去耦辐照场 B_2 的强度相当大，即 $\frac{\gamma B_2}{2\pi} \not\ll |\nu_A - \nu_X|$ 时，则观察核的频率或化学位移会移动，这种现象称为 Bloch-Siegert 效应，这种位移称为 Bloch-Siegert 位移。

$$\Delta\nu = (\nu_A - \nu_X) - \frac{\left(\frac{\gamma B_2}{2\pi}\right)^2}{2(\nu_A - \nu_X)}$$

当需要精确测定化学位移时，要考虑 Bloch-Siegert 位移。利用这个位移可测定 B_2 的强度，估计它的大小。

Bloch 方程　Bloch equations　描述磁化矢量 $\boldsymbol{M}$ 运动的经典方程。体系 $\boldsymbol{M}$ 的运动有两个独立的因素起作用。一是外加磁场 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{M}$ 的相互作用项，另一是体系本身的弛豫。Bloch 方程为 $\frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = \gamma(\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{B})$ + 弛豫项。NMR 实验中，在 z 方向上施加的静磁场 $\boldsymbol{B}_0$，在 x（或 y）方向上施加一射频场 $\boldsymbol{B}_1$，并且忽略与 $\boldsymbol{M}$ 进动方向相反的一支圆偏振场。具体地说，对于 $\gamma > 0$ 的核只考虑在左旋圆偏振场 $\boldsymbol{B}_1 e^{-i\omega t}$ 的作用，这样 $\boldsymbol{B}$ 的作用可分为 $B_z = \boldsymbol{B}_0$；$B_x = \mathbf{B}_1\cos\omega t$；$B_y = -B_1\sin\omega t$。在初始热平衡时有 $\boldsymbol{M}_z = \boldsymbol{M}_0$，$\boldsymbol{M}_x = \boldsymbol{M}_y = 0$，并且在稳态假设下解得某 t 时刻 $\boldsymbol{M}$ 的各个分量为

$$M_x = \frac{\gamma M_0 T_2 B_1 [T_2(\omega_0 - \omega)\cos\omega t + \sin\omega t]}{[1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + (\gamma B_1)^2 T_1 T_2]}$$

$$M_y = \frac{\gamma M_0 T_2 B_1 [\cos\omega t - T_2(\omega_0 - \omega)\sin\omega t]}{[1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + (\gamma B_1)^2 T_1 T_2]}$$

$$M_z = \frac{M_0\{1 + [(\omega_0 - \omega)T_2]^2\}}{[1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + (\gamma B_1)^2 T_1 T_2]}$$

式中，M_0 为初始磁化矢量；T_1、T_2 为纵向、横向弛豫时间；γ 为核的磁旋比。当 $\boldsymbol{B}_1$ 的角频率 ω 与核的拉摩进动频率 ω_0 相差（$\omega_0 - \omega$）甚大时，$\boldsymbol{M}$ 的横向分量 $\boldsymbol{M}_x$ 和 $\boldsymbol{M}_y$ 都很小，而纵向分量 $\boldsymbol{M}_z$ 较大。当 $\omega = \omega_0$ 时发生 NMR 现象，$\boldsymbol{M}_x$，$\boldsymbol{M}_y$ 将很大，而 $\boldsymbol{M}_z$ 较小。通常在 x 方向上施加 $\boldsymbol{B}_1$ 时便在 y 方向上接收 NMR 信号。

Brönsted 酸碱质子理论　Brönsted proton theory of acid-base　1923 年由

丹麦的布朗斯特（Brönsted）和美国的劳莱（Lowry）提出。该理论认为，凡能给出质子的物质都是酸，凡能接受质子的物质都是碱。由质子授受关系联系起来的酸和碱，称为共轭酸碱对（conjugate acid-base pairs）



$$\text{酸} \rightleftharpoons H^+ + \text{碱}$$

例如，NH_4^+ 与 NH_3 就是一共轭酸碱对。酸碱反应的实质是两个共轭酸碱对之间的质子迁移反应。质子理论中不存在盐的概念，盐水溶液的酸碱性是由其离子酸和离子碱的相对强弱决定的。酸碱质子理论能解释酸碱电离理论无法解释的许多问题，扩大了酸碱的范围，是酸碱理论的一种发展，但它对于不涉及质子授受的一些反应，例如对碱性物质 CaO 与酸性物质 SO_3 之间的反应，仍无法解释，表明此理论仍有一定的局限性。

B 底心格子 B-centered lattice 在单斜（以 c 轴为独立轴时）和正交晶系中可能出现的复格子。其特点是：平行六面体单位格子（晶胞）中，不平行于晶体学 b 轴的一对平面的面中心处存在着附加点阵点。每个 B 底心晶胞中含有两个点阵点。

B 吸收带 B absorption band 芳香族（包括杂环芳香族）化合物的特征吸收带，由苯类（Benzenoid）得名。它的强度介于 K 吸收带和 R 吸收带之间。

B. E. T 吸附等温式

B. E. T. adsorption isotherm B. E. T 吸附等温式适用于吸附过程中的多分子层吸附现象。吸附质在吸附剂表面上吸附，常常不仅是单分子层，更普遍的情况是形成多分子层吸附。布隆努尔（Brunauer）、埃梅特（Emmett）和特勒尔（Teller）根据达到吸附平衡时，每个吸附分子层的吸附速度和脱附速度相等，并假设第一层吸附焓 ε_1 不同于其他较高层吸附焓 ε_l（当吸附质为气体时，ε_l 等于吸附气体的液化焓）的原理，推导了多层吸附模型，得到

$$V = \frac{V_m cp}{(p_0 - p)[1 + (c-1)(p/p_0)]}$$

$$c = \exp\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_l}{RT}\right)$$

此式称为 B. E. T. 吸附等温式。式中，V 为吸附于吸附剂上的物质的体积；V_m 为单分子层盖满表面所需的吸附剂体积，p 为体系压力，p_0 为吸附质平衡蒸气压。以 $\frac{p}{V(p_0 - p)}$ 对 $\frac{p}{p_0}$ 作图，可得到一条直线。由直线部分的斜率和截距可得 V_m，再由 N_2 分子大小可求得吸附剂比表面积。B. E. T. 吸附等温式可用于对各种物质表面性质的研究，例如，表面吸附焓 ε_1，多孔物质的比表面积等。

C，K，L，J，Q，S，V，W 和 X 波段 C，K，L，J，Q，S，V，W and X band ESR 谱仪一般均为定频扫场型，即在一定微波频率下扫描磁场，检测 ESR 信号。根据微波频率高低不同，习惯上分为不同的波段。在 ESR 测量中最常用的是 X 波段（8～12GHz）、此外 L 波段（1～2GHz）、Q（25～40GHz）、W 波段（80～120GHz）ESR 现也有所应用。

C 波段（4～8GHz）、K 波段（18～25GHz）、J 波段（12～18GHz）、S 波段（2～4GHz）及 V 波段（40～80GHz）ESR 相对使用较少。

C-T 平面光栅装置 C-T plane grating mounting 是由 Czerny 和 Turner 提出的一种平面衍射光栅工作装置，由入射狭缝、准直镜、平面光栅、聚焦镜和出射狭缝构成，是大多数光栅分光光度计中最常用的光栅系统。入缝位于凹球面反射准直镜焦点处，从入缝射出的光被准直镜变成平行光束投射到平面光栅上；被光栅衍射色散后的不同波长的光束投射到光谱聚焦镜上，由凹球面反射聚焦镜会聚的各种波长光束在光谱焦面上形成相应的各波长光的谱线，其中某一波长的谱线与位于焦面上的出射狭缝重合时，就能从出射狭缝射出该波长的单色光束。转动衍射光栅，可以改变各波长谱线在光谱焦面上的位置，从而使出射狭缝射出的单色光波长随之变化。

Carr-Purcell-Meiboom-Gill 法 Carr-Purcell-Meiboom-Gill Method 简称 CPMG 法。一种较准确的测量横向弛豫时间 T_2 的方法。Meiboom 和 Gill 进一步改进 CP 法，采用脉冲序列是 $\left(\frac{\pi}{2}\right)_{x'}-[-\tau-\pi_{y'}-\tau$（回波、检测）$]_n$。每经 2τ 时间间隔得到正的回波。每两次 $\pi_{y'}$ 脉冲将抵消因为脉冲倾倒角的不准确而引进的误差，因此测量结果更准确。参见 Carr-Purcell 法条、自旋回波法条。

Carr-Purcell 法 Carr-Purcell method；CP 以 Carr 和 Purcell 两人命名的测量横向弛豫时间 T_2 的方法，简称 CP。用 $\left(\frac{\pi}{2}\right)_{x'}-[-\tau-\pi_{x'}-\tau$（回波，检测）$]_n$ 脉冲序列在 τ，3τ，5τ，…时刻施以 $\pi_{x'}$ 脉冲，而在 2τ，4τ，6τ，…时刻依次接收回波顶（极大）及随后的信号，因此只在一次实验中多次测量各个回波的幅度，由指数衰减的关系式求得 T_2。实验时由于 π 脉冲误差累积起来会影响实验的精确性，为克服此缺点，将 $\pi_{x'}$ 脉冲改为相位交替的脉冲，即第一个 π 脉冲施加在 x' 轴，而第二个脉冲则施加在 $-x'$ 轴上。此即改进的 CP 序列。

Carr-Purcell 脉冲序列 Carr-Purcell pulse sequence 是测量横向弛豫时间 T_2 的一种脉冲序列。因为自旋回波法消除了不均匀磁场对测量 T_2 的影响，可以从回波振幅的衰减曲线 $\exp\left(-\frac{t}{T_2}\right)$ 算出 T_2 的数值。利用通常的 $90°-\tau-180°$ 双脉冲检测自旋回波时，为了保证恢复到热平衡态，需要在检测回波信号后等待较长时间（远大于纵向弛豫时间 T_1）后才能施加下一个改变了 τ 的脉冲序列进行检测，要这样测定一系列回波振幅就需花费较长时间。如果采用 Carr-Purcell 脉冲序列，即把 $90°-\tau-180°$ 脉冲序列改进为 $90°-\tau-(180°-2\tau)_n$ 脉冲序列，而同时在每个 $180°$ 脉冲后经一定时间 τ 检测脉冲回波，直至回波信号衰减到无法检出为止，相当于在一直观察一次 $90°$

脉冲后的横向磁场强度的变化，那么可以大大减少测量 T_2 所需的时间。

^{13}C-NMR 定量谱 ^{13}C-NMR quantitative spectrum 利用反门控去耦方式对^{1}H 去耦而观测^{13}C 时所得到的各^{13}C 谱呈单峰。由于采集 FID 信号期间对^{1}H 全去耦，而核欧沃豪斯效应（NOE）刚开始产生，采集信号时便终止，因此接收到的是无 NOE 或 NOE 受到抑制的^{13}C 的信号，其谱峰面积基本反映了各相应^{13}C 的摩尔分数，直接指出分子中碳原子的个数或它的整数倍。因此称为^{13}C-NMR 定量谱，有时也称为无 NOE 的^{13}C-NMR 谱。实验中应注意将脉冲间隔的时间设定得足够长，使在施加每次观测脉冲前体系都恢复到统一的初始热平衡状态，才能获得定量谱。参见**门控去耦**条。

^{13}C-NMR 化学位移的近似估算法 approximate estimate method of ^{13}C-NMR chemical shift 利用取代基对所研究核的化学位移贡献的加和性，人们总结了大量^{13}C-NMR 谱峰的化学位移的规律，获得经验算式及相应的取代基的取代常数，由此能估算其化学位移值的大小。对于直链及支链开环烷烃中第 k 个碳的化学位移 δ_k 可用 Grant-Paul 经验式或 Lindeman-Adam 经验式来估算。不同种有机母体基团上的碳的化学位移有不同经验算式，苯环上碳的化学位移也有其经验式。写出分子结构式，按经验式即可对所讨论的碳原子的 δ 值进行估算。

Cottrell 方程式 Cottrell equation 一溶液体系在外加电压的作用下，去极剂 O 在电极表面还原为 R 的反应：$O + ne = R$。假定电解前溶液中只有物质 O，其浓度为 c_O^*，在电解过程中，电极表面 O 的浓度迅速降低，离电极表面愈远的地方，O 的浓度愈大，溶液本体中 O 朝着电极表面方向扩散，产物 R 由电极表面向溶液本体中扩散。由于溶液伸展到无限远的距离（实际上是接近于无限远），这个条件如得到满足，则称为“半无限”扩散。在忽略迁移和对流作用以及 O 和 R 均不在电极上被吸附条件下，如果圆盘电极的半径很大，趋向于无限，则该电极上的扩散是垂直于圆盘表面一个方向（z 方向）的一维扩散，其扩散方程为 $\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$。实验条件的不同，决定了求解上式的初始和边界条件。初始条件描绘了电解前（$t=0$）溶液中的情况，$t=0$，$z=0, c_O(z,t)=c_O^*, c_R(z,t)=0$；边界条件描绘了电解开始后的情况，$t>0$，$z=0, c_O(z,t)=0$，表示电解开始以后外加电压加到了产生极限电流的位置，电极表面 O 的浓度立即降至零；$t>0, z\to\infty, c_O(z,t)=c_O^*$ 表示“半无限”的条件得到满足。根据 Laplace 变换法，求解上述偏微分方程式，即得 Cottrell 方程式。

$$i_d = \frac{nFAD_O^{\frac{1}{2}}c_O^*}{\pi^{\frac{1}{2}}t^{\frac{1}{2}}}$$

式中，i_d 为平面电极线性极限扩散电流；n 为电极反应的电子转移数；F

为法拉第常数；A 为电极面积；D_0 为扩散系数；c_0 为溶液本体浓度。在一定的实验条件（包括一定形状和大小的静止平面电极）下，极限扩散电流 i_d 和物质的浓度 c_0 成正比。Cottrell 方程式是伏安法的一个基本公式和理论基础，已知电极反应的 n 就可求得扩散系数 D_0。

C 底心格子 C-centered lattice 在单斜和正交晶系中可能出现的复格子。其特点是：平行六面体单位格子（晶胞）中，不平行于晶体学 c 轴的一对平面的面中心处存在着附加点阵点。每个 C 底心晶胞中含有两个点阵点。

3D-HN(CA)CO 谱 3D-HN(CA)CO 见 **3D-HNCO** 条。

3D-HN(CA)HA 谱 3D-HN(CA)HA 见 **3D-HNCO** 条。

3D-HN(CO)CA 谱 3D-HN(CO)CA 见 **3D-HNCO** 条。

DNA 复制 DNA replication 以 DNA 双链为模板，合成两个与亲代 DNA 完全相同的 DNA 分子的过程。在子代的两个 DNA 分子中各保留一股亲代的 DNA 链，故为半保留式复制。原核生物 DNA 复制形式有滚环式和 θ 形式两种，真核细胞中线性双链 DNA 的复制是在特异点上形成复制泡开始的（每个 DNA 分子上有数百个复制起始点），复制沿复制泡两端向相反方向等速进行，形成大的复制叉。由于 DNA 的两条互补链是反向平行的，复制叉的移动与其中一条模板链的 3′→5′方向重合，而与另一条模板链的 5′→3′方向重合。但是 DNA 合成均为 5′→3′，故在 3′→5′走向的模板链上合成新链是连续的，而在 5′→3′走向的模板链上合成新链是不连续的，先合成冈崎片段，再连接成长链。复制叉的延伸需 DNA 继续解链，这一过程由解链蛋白催化。

DNA 工程 DNA engineering 基因工程经历了基因操作（gene manipulation）、基因重组（gene recombination）、基因工程（gene engineering）、分子克隆（molecular cloning）、DNA 工程（DNA engineering）5 种术语的变化，虽然它们都是基因工程的代名词，基本含义相同，但反映的层次、范围有所不同。20 世纪 70 年代初人们用遗传分析方法从细胞学水平了解基因到体外操纵 DNA 了解基因，所以叫基因操纵。后来认为基因操纵的核心是基因重组。20 世纪 70 年代中、后期，由于出现了工程菌以及实现基因重组和后处理都有工程化的性质，所以，基因工程这一名词普遍被使用。20 世纪 80 年代初，由于基因工程需重组载体多拷贝复制、建立起无性系，所以“clone”开始普遍被使用，后来克隆这个名词有可以表示把外源基因整合到载体上建立无性系这一过程，所以人们用分子克隆来表示基因工程。现在基因工程远不限于建立工程细胞，还包括许多基因组的改造、核酸序列分析、分子进化分析、分子免疫学等，但操纵的核心是 DNA。因此“DNA 工程”似乎更具概括性。

DNA 扩增仪 DNA amplifier 也称 PCR 仪或热循环仪，统指在体外进行 DNA 扩增的仪器。其关键部件是一个由计算机控制的精密温度控制器，在仪器内，样品管基座温度控制精度必须保证在 ±0.1℃，均匀度控制在 ±0.5℃以内，样品管之间不能形成温度梯度。DNA 扩增仪按其结构特征可分为两种主要类型，即恒温水浴加热型和金属块加热、制冷循环型。

DNA 酶 DNA enzyme 能够切割 DNA 分子中磷酸二酯键而使 DNA 分子降解的酶。DNA 酶有两种类型：核酸内切酶和核酸外切酶。它们中有的作用为单链特异性，有的为双链特异性或序列特异性。DNase Ⅰ 的分解产物是带有 5′磷酸末端的寡核苷酸，作用的最适 pH 值为 6.8～9.2，需要 Mg^{2+} 参与。DNase Ⅱ 的分解产物是带 3′磷酸末端的寡核苷酸，作用最适 pH 值为 4.5～5.5，酶活性被 Mg^{2+} 所抑制。在 DNA 损伤的修复中，Dnase 的作用是切除 DNA 分子中受损伤的部位。

DNA 修复 DNA repair 在特异酶参与下，可以降低 DNA 碱基序列因辐射和其他诱变因素所致损伤并修复这些损伤的细胞的过程。DNA 修复有以下几种主要形式和机理：（1）光复活修复（针对嘧啶二聚体）；（2）自杀修复（针对 O6 甲基鸟嘌呤）；（3）切除修复（excision repair），此种修复是将损伤的碱基切除，由 DNA 聚合酶 Ⅰ 从损伤部位的 3′-OH 端合成相应一段正常序列填补被切除部分，再由 DNA 连接酶将链中缺口连接起来。切除修复包括对紫外线所致损伤的修复（Uvr^{+} 依赖性修复）、对单个非正常碱基从糖苷键上切除修复（糖苷键修复）和对错配的修复；（4）重组修复（recombinational repair），这种修复属复制后修复（因损伤来不及在复制前修复），是利用现成存在的另一段同源序列通过重组原理替补空隙，因此，此种修复完成后损伤仍然存在，只是经过若干代后损伤被“稀释”而可忽略；（5）SOS 修复，这是对比较严重的损伤的一种修复，细胞迫于存活，在修复合成时将错误碱基掺入到 DNA 链中，造成易错性修复（error-prone repair）。

Edman 化学降解法 Edman degradation 也称苯异硫氰酸酯（PITC）法。用于肽段 N 末端氨基酸的分析。多肽或蛋白质的末端氨基能与 PITC 作用，生成苯氨基硫甲酰多肽或蛋白质，简称 PTC-多肽或蛋白质。后者在酸性有机溶剂中加热时，N 末端的 PTC-氨基酸发生环化，生成苯乙内酰硫脲的衍生物并从肽链上掉下来，除去 N 末端氨基酸后剩下的肽链仍然是完整的，因为 PTC 基的引入只使第一个肽键的稳定性降低。反应中代表 N 末端残基的 PTH-氨基酸，经有机溶剂抽提干燥后，可用薄层层析（如硅胶薄膜和聚酰胺薄膜等）、气相色谱和高效液相色谱等方法进行鉴定。

EDTA 滴定 EDTA titration 一类配位滴定法。EDTA（乙二胺四乙酸或其二钠盐）能与绝大多数金属离子形成稳定的 1∶1 配合物，故可在一定条件下用 EDTA 标准溶液直接滴定这些金属离子来确定它们的含量，亦可利用间接的方法测定非金属元素。例如，可将 PO_4^{3-} 沉淀为 $MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$ 后，通过滴定 Mg^{2+} 间接测定 PO_4^{3-} 含量。

EPA 及 DHA 分析 analysis of EPA and DHA EPA 的化学名称为 20 碳五烯酸，DHA 的化学名称为 22 碳六烯酸。两者都是鱼油中具有保健作用的主要成分，其中 EPA 的主要作用是软化血管、抑制动脉硬化；DHA 的主要作用是促进中枢神经系统发育，有益于大脑保健。目前的分析方法为气相色谱法。

ESR 剂量测定法 ESR dosimetry 利用 ESR 测定人工辐射剂量的方法。很多物质在受到各种人工辐射后，会造成自由基或缺陷的产生、增加或减少，显然辐射剂量与自由基或缺陷的累积浓度密切相关。通过用 ESR 法测定因辐射诱导的自由基或缺陷的浓度，经过适当计算和修正（如扣除自然辐射的影响），就可测定辐射剂量。与常用的热致发光剂量测定方法相比，ESR 剂量测定法的优点是对同一样品反复测定不会影响辐射剂量的测定结果，但其缺点是灵敏度要低很多。

ESR 年代测定 ESR dating 在自然界里存在有 ^{238}U 和 ^{232}Th 以及它们经 α、β 衰变后所产生的各种放射性元素。伴随这些核的衰变所放射出的 α 射线、β 射线能够使天然矿物及化石电离，形成未偶电子和空穴。同时，电子和空穴会再复合，或被不纯物晶体缺陷捕获。因为由自然界放射线所形成的未偶电子及晶体缺陷随时间的推移而积累，可以用 ESR 检测出来。当人为地用放射线照射矿物或化石，则与自然放射线的情形一样，未偶电子增加，ESR 信号强度增大。如能估算出矿物或化石所在地一年的放射线量，就可以由 ESR 信号强度的工作曲线外推，推算出放射线量为零时，即矿物或化石形成的年代。这就是 ESR 年代测定。由 ESR 年代测定法测定的年代称为 ESR 年代。ESR 年代测定法可以测定超过碳-14（^{14}C）年代测定法的上限 4 万年，可达数 10 万年的年代范围，在考古学及地球化学等领域有重要应用。

ESR 年龄 ESR age 由 ESR 年代测定法测定的时间或年代称为 ESR 年龄。参见 **ESR 年代测定**条。

ESR 谱线型 line shape of ESR ESR 谱线的形状主要取决于样品的性质及其环境。理论上，ESR 谱的线型可分为高斯线型和洛伦兹线型两种。溶液样品的谱线一般是洛伦兹线型，而固体样品则近于高斯线型。有些情况下是这两种线型的混合。对于以外磁场 H 为函数的吸收线强度方程可写为洛伦兹线型

$$Y(H) = -\frac{Y_m}{T_2^2(H-H_0)^2+1}$$

高斯线型：

$$Y(H)=Y_m \exp[-b(H-H_0)^2 T_2^2]$$

式中，Y_m 表示吸收线中心的强度；H_0 为线中心的共振磁场；T_2 为自旋-自旋弛豫时间；b 为常数。具有同样半高宽的归一化高斯线型和洛伦兹线型的主要区别是后者有较长的拖尾。

ESR 显微镜 ESR microscopy 针对微小空间进行高分辨的 ESR 成像称为 ESR 显微镜，其分辨率可达微米以下。ESR 显微镜大致分为两类。一类是常规的 ESR 成像显微镜，使用足够大的磁场梯度以获得微小区域的自旋浓度分布；另一类是利用特殊设计的可插入谐振腔内紧靠样品表面的扫描装置的扫描型 ESR 显微镜，这类显微镜又可划分为局部磁场调制扫描型 ESR 显微镜、磁场扫描型 ESR 显微镜及微波扫描型 ESR 显微镜等。

ESR 样品管 ESR tube 通常将样品放在 ESR 样品管内进行 ESR 测试。样品管要求首先是没有顺磁性杂质，其次是微波损耗要少，即不致明显地使腔的 Q 值降低。因为普通玻璃含有的铁离子等顺磁性杂质、缺陷等可能也会产生 ESR 信号，会对样品信号的测试有影响，所以通常 ESR 样品管是高纯石英管。有时也可用优质玻璃管代替。根据所测样品的不同，所使用的 ESR 样品管的大小和形状也有所不同。例如，为了减少极性（介电常数）大的溶液对微波的吸收，需使用毛细管或扁平池。

Fick 第二定律 Fick's second law 在扩散过程中考虑浓度梯度随时间变化，导出 Fick 第二定律。离电极表面距离为 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 的两个截面，截面面积为 A，$\mathrm{d}x$ 为无限小，在时间 $\mathrm{d}t$ 内，两个截面间物质 O 浓度的变化量等于在 $\mathrm{d}t$ 时间内进入截面 $x+\mathrm{d}x$ 的摩尔数减去在同一时间内离开截面 x 的摩尔数，除以两截面间的体积，即

$$\mathrm{d}c_{\mathrm{O}}=\frac{\mathrm{d}N_{x+\mathrm{d}x,t}-\mathrm{d}N_{x,t}}{A\mathrm{d}x}$$

将 Fick 第一定律代入该式，得

$$\frac{\partial c_{\mathrm{O}}(x,t)}{\partial t}=D_{\mathrm{O}}\left(\frac{\partial^2 c_{\mathrm{O}}(x,t)}{\partial x^2}\right)$$

这称为 Fick 第二定律。其含义是：一个液层浓度随时间的变化率与沿扩散方向的浓度梯度随距离的变化率成正比，比例常数为扩散系数 D_{O}。

Fick 第一定律 Fick's first law 溶质浓度梯度的存在引起扩散，扩散方向由浓到稀，直到整个体系溶质的浓度相等扩散为止。在单位时间内，扩散通过截面上单位面积的物质 O 的物质的量（摩尔数）称为物质 O 的流量（flux），以 $J_{\mathrm{O}}(x,t)$ 表示。物质 O 的流量与浓度梯度成正比，即为 Fick 第一定律。其数学表达式为

$$-J_{\mathrm{O}}(x,t)=D_{\mathrm{O}}\frac{\partial c_{\mathrm{O}}(x,t)}{\partial x}$$

式中，$J_{\mathrm{O}}(x,t)$ 为离电极表面距离为 x，时间为 t 时的流量；D_{O} 为扩散系数；负号表示从浓到稀的扩散，$\frac{\partial c_{\mathrm{O}}(x,t)}{\partial x}$ 为浓度梯度。

FID 的采样时间 acquisition time for FID 记录自由感应衰减（FID）信号的时间。必须遵从取样定理，根据观测谱宽来设定采样的时间和采样点数。采样的时间理应尽可能地长，但取样时间过长将引进大量不必要的噪声，使信噪比恶化、灵敏度下降，因此一般采样时间取 3 - 5 倍的表观横向弛豫时间 T_2^* 比较合适。参见取样定理条。

FOCSY 二维 *J* 分解谱 fold-over corrected spin echo correlation spectroscopy two dimensional *J* resolved spectrum 同核2Dδ-*J*谱研究 T_2 短的大分子的改进实验。脉冲序列为$90°_x - t_1 - 180°_y$ - 回波采样(t_2)，大分子 T_2 短，线宽大，用普通 2Dδ-*J* 谱实验在取样前大部分信号已衰减。本脉冲序列在 180°脉冲后立即取样，采集整个回波信号，提高了分辨率、改善了灵敏度。类似地，也可以有异核 FOCSY 实验，其脉冲序列为：X 核是 $90° - t_1$ - 采集 FID（t_2）；^1H 核是在采集 FID 时宽带去耦。如果将 FOCSY 与重聚脉冲相结合，称为 RE-FOCSY 实验，可以研究低浓度的大分子的结构。

Frank-Condon 原理 Frank-Condon principle 关于分子光谱中不同电子状态的两个振动能级之间跃迁的规则。与核的振动速度相比，电子的跃迁速度（跃迁时间约 10^{-15}s）要快得多，电子跃迁时原子核的位置和速度来不及变化，核间距基本不变，因此，存在几率最大的核间距刚好相等时的两个振动能级间跃迁的概率最大，并呈现相应的强度分布的电子光谱。Frank-Condon 原理表明，只有处于两种不同能量状态下的核间距离无显著差别，以及原子核运动速度基本或完全等于零时，电子跃迁才能发生。由于电子跃迁时间短，因此吸收光谱只反映分子基态的平均信息。只有紧挨着吸光物种的溶剂分子可以影响其吸收光谱，故分子吸收光谱可以反映紧挨着吸光团平均溶剂层的信息，而对分子动力学不敏感。

F 分布 *F*-distribution 数理统计中一种常用的概率分布，描述方差比 $F = S_1^2/S_2^2$ 的概率分布特性，其概率密度函数为

$$\varphi(F) = \frac{\Gamma\left(\frac{f_1+f_2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{f_1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{f_2}{2}\right)} f_1^{\frac{f_1}{2}} f_2^{\frac{f_2}{2}} \cdot \frac{F^{\frac{f_1-2}{2}}}{(f_1+f_2F)^{\frac{f_1+f_2}{2}}}$$

式中，f_1 与 f_2 分别是计算方差 S_1^2 与 S_2^2 的自由度。它在精密度检验、方差分析、回归分析和试验设计中都有广泛的应用。

F 检验 *F*-criterion 用遵从 *F* 分布的统计量检验两正态总体方差齐性的一种统计检验方法。检验统计量

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2} \quad (S_1^2 \geqslant S_2^2)$$

因 S_1^2 与 S_2^2 分别是总体方差 σ_1^2 与 σ_2^2 无偏估计值，如果两总体方差是一致的，则 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$，$S_1^2$ 与 S_2^2 为同一

总体的方差估计值．S_1^2 与 S_2^2 在 σ^2 附近波动，不管用 S_1^2 或 S_2^2 估计 σ^2，都不会有系统误差，F 值应近似于或稍大于1。S_1^2 与 S_2^2 是由有限次测定得到的，用 S_1^2 与 S_2^2 估计总体方差会有些差异，但在统计上不应该是显著性差异。若由实验值计算的统计量值 F 大于在一定显著性水平 α 时的临界值 F_α，则有理由认为 S_1^2 与 S_2^2 同为 σ^2 的估计值的假设与实验事实有矛盾，不能被接受。换言之，S_1^2 与 S_2^2 不是同一总体的方差估计值。反之，若由实验值计算的统计量值 F 小于在一定显著性水平 α 时的临界值 F_α，人们没有理由拒绝 S_1^2 与 S_2^2 同为 σ^2 估计值的假设。换言之，S_1^2 与 S_2^2 在统计上没有显著性差异。F 检验在测定精密度检验、多因素优化试验、校正曲线中都有广泛的应用。

g 因子 g-factor 也称 g 值。是 ESR 波谱中的一个重要参数，它表征着磁场的共振位置。ESR 的共振条件是：$h\gamma = g\beta H_r$，这里 h 是普朗克常数，β 是玻尔磁子。在 ESR 谱仪中通常保持微波频率 γ 不变，于是只有共振磁场 H_r 和 g 因子是可改变的。因此只要测量共振时的磁强，就可确定与某种不成对电子相关的 g 值，从而获得化学键和分子或原子结构的信息。对于无轨道角动量的电子，其 g 因子刚好等于自由电子的 g 因子值，$g_e = 2.00232$。不少有机自由基的 g 因子非常接近这个数值。而多数过渡金属离子及其化合物的 g 因子则远离 g_e 值，原因是轨道角动量贡献较大。通常 g 因子是各向异性的，此时 g 因子应以 g 张量代替。

g 张量 g-tensor 各向异性的 g 因子应当用张量表示，在此情况下，自旋哈密顿中电子塞曼项的一般形式可写成

$$\hat{H} = \beta \boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{g} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}$$

这里 g 为一对称二级张量。但严格地讲，只有 $\boldsymbol{g}^2$ 才是真正的对称二级张量。在直角坐标系中

$$\boldsymbol{g}^2 = \begin{bmatrix} g_{xx}^2 & g_{xy}^2 & g_{xz}^2 \\ g_{yx}^2 & g_{yy}^2 & g_{yz}^2 \\ g_{zx}^2 & g_{zy}^2 & g_{zz}^2 \end{bmatrix}$$

通过测试和解析单晶样品的角度依存 ESR 谱，可得 $\boldsymbol{g}^2$ 张量在某一固定实验室坐标系中的各个张量元，并总后可以找出一主轴坐标系 xyz 使其对角化，其对角元 g_{xx}^2，g_{yy}^2，g_{zz}^2 为 $\boldsymbol{g}^2$ 张量的主值。开方后即可得到主值 g_{xx}，g_{yy}，g_{zz}。

g 值各向异性 g-anisotropy g 因子是 ESR 波谱中的一个重要参数。分子中的未偶电子，其 g 值往往偏离于自由电子的 g_e（$=2.00232$）。使 g 因子偏离于 g_e 的原因，来源于轨道磁矩，此轨道磁矩的贡献是通过自旋-轨道耦合使激发态掺入基态而产生的。对多数分子来说激发态的掺杂不是各向同性的，从而使 g 因子亦非各向同性，即 g 因子具有各向异性，其大小与自旋体系相对外加磁场的方向有关。在溶液中由于分子的快速滚动使所观测到的 g 值是各向异性 g 因

子的平均值。

Grant-Paul 经验式 Grant-Paul empirical formula 化学位移 $\delta_k = -2.10 + \sum_i A_i n_{ki} + \sum_j B_k(j)$，式中，$i$ 与 j 是傀标；式右第 2 项表示离开碳原子 k 相距 i 个化学键处的取代基或者原子数目 n_{ki} 对 CH_4 碳化学位移的修正值 A_i 的总贡献，$A_1 = 9.09$，$A_2 = 9.40$，$A_3 = -2.49$，$A_4 = 0.31$，$A_5 = 0.11$；$B_k(j)$ 中角标 k 表示附有不同氢个数的碳原子类型的代号，而 j 表示与碳原子 k 直接相连的碳原子的类型的代号。有 4 种碳原子类型 CH_3、CH_2、CH 及季碳 $\rangle C \langle$ 分别以 1、2、3、4 为其代号。$B_k(j)$ 有：$B_{11} = 0$，B_{21}、B_{31}、B_{12}、B_{22} 皆为 0，$B_{13} = -1.12$，$B_{14} = -3.34$，$B_{23} = -2.5$，$B_{24} = -7.23$，$B_{32} = -3.64$，$B_{33} = -9.47$，$B_{41} = -1.5$，$B_{42} = -8.36$。

Hartmann-Hahn 匹配条件 Hartmann-Hahn matching condition 指两个核体系相互发生能量交换时能量匹配要求的条件。两个核体系间发生交叉极化时必须满足 Hartmann-Hahn 条件：$\gamma_I \boldsymbol{B}_I = \gamma_S \boldsymbol{B}_S$。意味着 I 核在 $\boldsymbol{B}_I$ 场强下的 Zeeman 能级必须等于 S 核在 $\boldsymbol{B}_S$ 场强下的 Zeeman 能级。实现这个要求应使 I 核处于自旋锁定的情况下，对 S 核施加射频场使其强度满足该条件，因此确切地应为$\gamma_I(\boldsymbol{B}_1)_I = \gamma_S(\boldsymbol{B}_1)_S$。

Hill 图 Hill plot 用以计算络合反应、二聚反应和主客体反应等的结合常数。对于配体为 L 的 1∶1 的反应，其分配系数 f_{11} 为：$f_{11} = \frac{K_{11}[L]}{1 + K_{11}[L]}$。对于配位数为 n 且无相互影响的反应，则分配系数 $\bar{i}$ 为：$\bar{i} = \frac{nk[L]}{1 + k[L]}$。式中，$k$ 为结合常数。以配体浓度为自变量，分配系数为因变量，上面两式的一般数学表达式可写成：$y = \frac{dx}{f + ex}$。式中，x 和 y 分别为自变量和因变量；d、e、f 为系数。该式还可写成：$\frac{y}{(d/f) - (e/f)y} = x$。如果 $(d/f) = (e/f)$，便有：$\log \frac{y}{1-y} = \log x - \log \frac{d}{f}$。例如当 1∶1 结合时，方程表达式为：$\log \frac{f_{11}}{1 - f_{11}} = \log[L] - \log K_{11}$。以 $\log \frac{y}{1-y}$ 对 $\log x$ 做双对数图，得到斜率为 1 的直线。这种双对数图称为 Hill 图。一般简单结合体系的 Hill 图呈一直线。Hill 图已经被广泛应用到酶抑制以及协同结合等众多反应的研究中。

H 点标准加入法 H-point standard addition method 利用分析信号的加合性，将标准加入法与双波长测定相结合的一种分光光度法。在样品溶液中，对待测组分进行标准溶液加入（即在体积近似不变的情况下改变待测物的浓度），在选定的两个合适波长处测定被测溶液的吸光度，再以吸光度对标准加入量作图，可得两直线。所得两直线交于一点（H 点），

该点对应的浓度横坐标值即为待测物浓度，而对应的吸光度即为干扰物的吸光度贡献。该方法能消除干扰效应，提高方法的选择性，可应用于两个组分的同时分析。倘若与比例吸收点技术相结合，可扩展至三组分的同时分析。

^{1}H-NMR 化学位移的近似估算法 approximate estimate method of ^{1}H-NMR chemical shifts 利用核本身的屏蔽以及其周围取代基所造成的化学环境的差异，加上屏蔽作用的加和性，人们总结出了近似地估算所讨论核的化学位移值的大小的方法。对烷基氢有 Shoolery 经验式，对烯烃氢有 Tobey-Simon 经验式等，苯环氢也有经验式。

^{1}H 核检测的异核多键相关实验 ^{1}H detected heteronuclear multiple bond coherence; HMBC 借助于异核之间的弱耦合作用，利用 HMBC 脉冲序列抑制 $^1J_{CH}$，突出利用 $^2J_{CH}$, $^3J_{CH}$ 来产生异核多量子相干，由 ^{1}H 核间接检测低自然丰度和低磁旋比的核（如 ^{13}C, ^{15}N 等）的方法。HMBC 基本脉冲序列

$$
\begin{array}{ll}
{}^1\text{H 观测核} & 90^\circ_x \text{———————} \frac{t_1}{2} - 180^\circ - \frac{t_1}{2} - \text{采集 FID}(t_2) \\
{}^{13}\text{C} & -\tau_1 - 90^\circ_{\phi 1} - \tau_2 - 90^\circ_{\phi 2} \text{————————} 90^\circ_x \text{————}
\end{array}
$$

其中，$\tau_1 = \frac{1}{2\,^1J_{CH}}$；$\tau_2 = \frac{1}{2\,^nJ_{CH}}$；$\frac{t_1}{2} - 180^\circ - \frac{t_1}{2}$ 是赋以 δ_C 标记的信号，对 ^{13}C 的第 1 个 90° 脉冲起低通滤波作用，将由 $^1J_{CH}$ 耦合的信息抑制掉，脉冲序列利用相循环有效地抑制零量子相干。HMBC 谱 F_1 域是 X 核（如 ^{13}C, ^{15}N）的化学位移，F_2 域是 ^{1}H 的化学位移，交叉峰表示通过 2 或 3 个化学键的相关或连接关系，由于抑制得不彻底也能看到受 $^1J_{CH}$ 分裂的交叉峰。由于 HMBC 检测的是 ^{1}H，而不是稀核，因此灵敏度大大提高。

Ilkovic 方程式 Ilkovic equation Ilkovic 在 1934 年首次提出了滴汞电极上的扩散电流方程式，这就是著名的 Ilkovic 方程式。滴汞电极上的扩散过程有两个特点：（1）滴汞呈球形，属于球形扩散；（2）电极面积不断增长，引起溶液发生对流运动。因此，滴汞电极附近任一点物质浓度随时间的变化决定于球形扩散和溶液对流。由于滴汞电极附近的扩散层厚度很薄，几乎可以忽略不计，可将滴汞电极的球形扩散当作面积不断变化的平面电极的线性扩散来处理。利用 Laplace 变换法进行求解，由 Fick 第一定律求得 Ilkovic 方程式

$$i_d = 605nD_0^{\frac{1}{2}}m^{\frac{2}{3}}t^{\frac{1}{6}}c_0^*$$

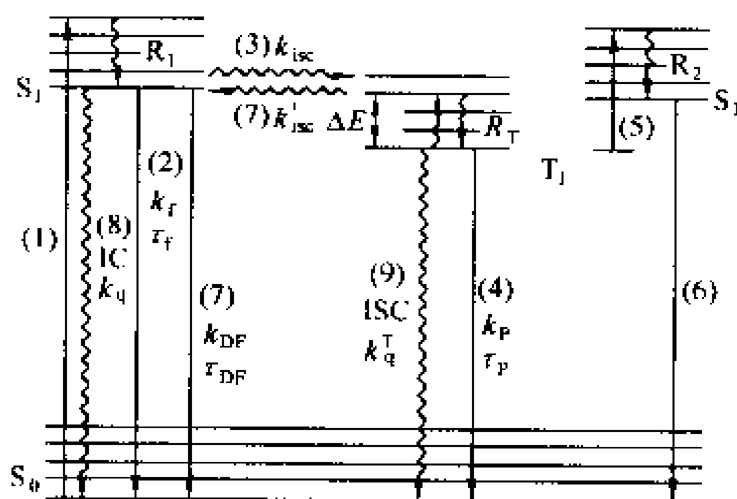
式中，i_d 是扩散电流（A 或 μA）；D_0 是扩散系数（$cm^2 \cdot s^{-1}$）；m 是滴汞流速（$g \cdot s^{-1}$ 或 $mg \cdot s^{-1}$）；t 是滴汞增长的时间（s）；c_0^* 是浓度（$mol \cdot cm^{-3}$ 或 $mmol \cdot L^{-1}$）。由该方程得知，用同一毛细管在恒定的汞柱高度时，扩散电流与溶液中被测物质

的浓度成正比，这是极谱定量分析的基础。而且扩散电流与校正的汞柱高度的平方根成正比。这一线性关系不仅进一步验证了 Ilkovic 方程式的有效性，也是判断纯扩散控制电流的实验依据。

I_0 的校正 the correction of I_0 检测光栅型红外光谱仪器性能的一个指标。具体的方法是指在二个光路中均不放吸收池，以相同的狭缝、噪声水平、扫描速度和记录时间扫描全区，经 I_0 校正后所记录的轨迹应是平坦的，即画笔的基线波动应在 ±0.01 吸光度范围内。

J 调制 *J*-modulation 磁化矢量的强度依照耦合常数 *J* 的频率而变化的过程。

Jablonski 能级图 Jablonski diagram; Jablonski scheme 用来表示分子的电子云结构或电子跃迁状态的分子轨道能级图。Jablonski 于 1933 年提出。后来人们就以他的名字命名，称之为 Jablonski 能级图。从图中可以理解光吸收后产生荧光（$S_1 \rightarrow S_0$）、非辐射失活（$S_1 \rightarrow S_0$）、系间窜跃（$S_1 \rightarrow T_1$）、磷光辐射（$T_1 \rightarrow S_0$）以及三线态非辐射失活（$T_1 \rightarrow S_0$）等各状态间变换的光物理过程。在光致发光分析中，Jablonski 能级图对理解其发光特性很有帮助。



Jablonski 能级图

S_0—基态单线态；S_1—第一激发单线态；T_1—第一激发三线态；
R—振动失活；IC—内转换；ISC—系间窜跃；
k—跃迁的速率常数；τ—辐射寿命
（1）—光吸收；（2）—荧光辐射；（3）—系间窜跃；
（4）—磷光辐射；（5）—T-T 湮灭；（6）—T-T 湮灭延迟荧光；
（7）—热活化延迟荧光；（8），（9）—非辐射失活

Karplus 关系式 Karplus relationship 通过 3 个化学键的磁性核之间的耦合常数 ^3J 与组成它们的两面角 ϕ 的关系式为：$^3J = J_0\cos^2\phi + C$（当 $\phi = 0° \sim 90°$ 时）与 $^3J = J_{180}\cos^2\phi + C$（当 $\phi = 90° \sim 180°$ 时），式中，J_0 和

J_{180}分别表示ϕ为0°和180°时的J值；C为一常数。修正后得到$^3J = A + B\cos\phi + C\cos2\phi$，这就是Karplus关系式。它可用于$^3J_{H-C-C-H}$、$^3J_{C-C-C-H}$。对于$^3J_{H-C-C-H}$式中，$A = 4.22$Hz，$B = 0.5$Hz，$C = 4.5$Hz。后来曾修正为$A = 7$Hz，$B = -1$Hz，$C = 5$Hz，可能更实用。不同体系常数$A$、$B$、$C$会略有不同。利用它可说明$J_{反} > J_{顺}$，六元环中，轴立氢间的$J_{aa}$大于轴立氢与平伏氢间的$J_{ae}$和平伏氢间的$J_{ee}$。利用$^3J$实测值以及Karplus公式可推测分子的结构。

Kivelson 公式 Kivelson equation 如果一个顺磁体系含有一个具有核自旋（$I \geqslant \frac{1}{2}$）的原子，则将观测到由该原子核引起的$2I+1$个超精细耦合裂分的峰。但这$2I+1$个峰并非是等强度的，每一条峰的线宽由Kivelson公式表达为

$$\Delta H_{pp}(m_I) = a + bm_I + cm_I^2$$

$$a = \left(\frac{3}{20}A^2 + \frac{4}{45}B^2H^2\right)\tau,$$

$$b = \left(-\frac{4}{15}ABH\right)\tau,$$

$$c = \left(\frac{1}{8}A^2\right)\tau,$$

$$A = \frac{4\pi}{3}\left\{A_{zz} - \frac{1}{2}(A_{xx} + A_{yy})\right\},$$

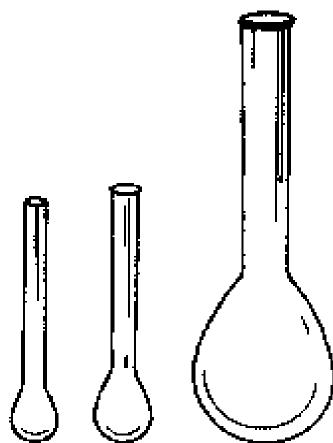
$$B = \frac{\beta}{h}\left\{g_{zz} - \frac{1}{2}(g_{xx} + g_{yy})\right\},$$

$$H = \frac{h\nu}{g\beta}$$

式中，m_I是核自旋的磁量子数；系数a，b及c是各向异性g因子、各向异性超精细耦合常数A、磁场$\boldsymbol{H}$及旋转相关时间τ的函数。在简单模型里，旋转相关时间τ表示为：$\tau = \frac{4\pi r^2\eta}{3KT}$，式中，$r$是分子半径；$\eta$是溶剂黏度。

Kjeldahl 分析 Kjeldahl analysis 亦称“克氏定氮法”。一种重要的测定有机化合物中氮含量的方法。有机化合物和浓硫酸在铜、汞盐催化下高温煮沸时，其中所含氮被转化为NH_4HSO_4（此步称为消化，digestion）。溶液经中和，加浓碱并加热，蒸出的氨（NH_3）用4%的硼酸溶液吸收（$NH_3 + H_3BO_3 \rightarrow NH_4^+ + H_2BO_3^-$），以甲基红作指示剂用标准酸溶液滴定$H_2BO_3^-$；亦可用过量标准HCl溶液吸收氨，再用标准NaOH溶液滴定过量的HCl，从而可得试样中氮的含量。有机化合物除偶氮、肼类及某些硝基化合物不易消化而需采取其他特殊处理外，大多数都可用此法测定其中的氮含量。该法因能用于微量氮的测定而获得广泛应用。

Kjeldahl 烧瓶 Kjeldahl flask 用于有机试样的湿式消解和溶解金属试样



时的一种玻璃容器（如上页图），有从10毫升到数百毫升的多种规格。由于有较长的颈部，能有效避免溶解或消解试样时的飞溅或暴沸造成的试样损失。

K-K 转换 Kramers-Kronig transform 镜面反射光源经K-K转换这种数据处理可获得吸收光谱。处理时由于引入可调参数，可绘制成与之相应的吸收光谱和折射率光谱。镜面反射光谱常常总是反射和漫反射的混合谱，其谱图不仅随波长而且也随样品的折射率而变化，因此得到的是类-导数特征的而不是对称的吸收带，不便分析。K-K转换所获得的吸收光谱谱峰的吸收率是相对的，不是绝对的，因此不能作定量分析的依据。若所测得样品的光谱以表面反射贡献为主，K-K转换有助于谱的定性解释，因为峰形和峰强度会变形。

Knight 位移 Knight shift W. D Knight于1949年首先观测到。在同样外磁场下，^{63}Cu的核磁共振频率在金属中比在抗磁性物质CuCl里要高0.237%。这是金属中存在的普遍现象。设ν_m和ν_d分别为某核在金属中和抗磁物质中的核磁共振频率，$\Delta\nu=\nu_m-\nu_d$，定义$\frac{\Delta\nu}{\nu_d}$为Knight位移，它以百分数表示。很多金属的导电电子处于s态，具有以核为对称中心的球形电子云分布。s态电子云在核体积内几率密度不为零（即与核有所谓的费米接触）。与核自旋产生的场之间有较强的耦合，这是Knight位移的主要因素。Knight位移有5个特性：（1）金属元素Knight位移恒为正值；（2）不因静磁场B_0变化而变化；（3）几乎不受温度影响；（4）通常随核电荷Z增大而增大；（5）s态导电电子的位移比非s态的要大得多。

Kramers 定理 Kramers' theorem 如果自旋体系中含有两个以上的未偶电子时，将会产生零场分裂，但此时并非所有能级简并被完全解除。对于含有奇数个未偶电子的体系（自旋总量子数为半整数），在零场时，每个能级至少要保持二重简并度。这就是Kramers定理。不能被零场分裂解除简并的二重态称为Kramer二重态。Kramer二重态只有在外加磁场的作用下才能解除简并。

Kubelka-Munk 转换 Kubelka-Munk transform 在粉末样品的中红外漫反射光谱的测定中，由于样品对红外光既有反射又有吸收，因此谱图的信号会很弱，信噪比差。Kubelka-Munk（K-M）转换是经常使用的校正谱图的数据处理方法。样品厚度大于入射光的透射深度时的漫反射光谱R与K-M光谱$F(R)$之间的关系如下式所示。

$$F(R)=\frac{(1-R)^2}{2R}$$

漫反射光谱R峰高与样品浓度之间不呈线性关系，因而峰高不能作为定量分析之用，但在经过K-M转换后，谱带的强度与样品的浓度呈线性关系（即遵循比尔定律）。由于样品在中

红外区的吸收一般都很强，而K-M转换只适用于非常弱的吸收，因此，并不是所有样品的漫反射红外光谱图经过K-M转换后都能够得到很好的定量结果。

K吸收带 K absorption band 由德文 Konjugation 共轭作用而得名，指由 $\pi \to \pi^*$ 跃迁引起的吸收带，是强吸收带[与 λ_{max} 对应的摩尔吸光系数 ε_{max} 通常在 $(1 \times 10^3) \sim (2 \times 10^5)$ 之间]。相当于整个共轭双键的基态向极性激发态的跃迁。例如



C=C—C=C→C⁺—C=C—C⁻



C=C—C=O→C⁺—C=C—O⁻

K吸收带的 λ_{max} 随共轭双键的长度而增加。对芳香族化合物的K带，有的文献称为E带。

Lindeman-Adams 经验式 Lindeman Adams empirical formula 化学位移 $\delta_k = B_s + \sum_{m=2}^{4} D_m A_{sm} + \gamma_s N_{k3} + \Delta_s N_{k4}$，式中，$s$ 为与碳原子 k 直接连接的碳原子数数目；D_m 为邻接 k 的碳原子属于仲（$m=2$）、叔（$m=3$）、季（$m=4$）的数目，这里 D_2、D_3、D_4 可为零，N_{k3} 及 N_{k4} 分别是离碳原子 k 相距3个及4个键的碳原子数数目。B_s、A_{sm}、γ_s、Δ_s 分别有如下的参数：

s	1	2	3	4
B_s	6.80	15.34	23.46	27.77
A_{s2}	0.56	9.75	6.60	2.26
A_{s3}	17.83	16.70	11.14	3.96
A_{s4}	25.48	21.43	14.70	7.35
γ_s	−2.99	−2.69	−2.07	0.68
Δ_s	0.49	0.25		

各种取代苯中环碳的化学位移 δ 的计算经验式：$\delta = 128.5 + \Delta\delta_{本位} + \sum_o \Delta\delta_o + \sum_m \Delta\delta_m + \Delta\delta_p$，式中，$\Delta\delta$ 是取代基的化学位移常数；脚标本位、o、m、p 分别表示本位、邻位、间位及对位的取代基的位置。当它们皆为H时，则 $\Delta\delta$ 皆为0；如取代基为 CH_3 时，则分别为93、0.8、0、−2.9；如为 $SiMe_3$ 则分别为13.6、4.6、−0.9、−0.9；C_6H_5 时分别为13、−1、0.4、−1；为COOH时分别有2.1、1.5、0、5.1；为OH时分别有26.9、−12.7、1.4、−7.3；NO_2 时分别为20.0、−4.8、0.9、5.8；F时分别有34.8、−12.9、1.4、−4.5；I时分别有−32、10、3、1。

Maxam-Gilbert 化学法 Maxam-Gilbert chemical method 测定DNA序列的一种化学方法。先把待测的DNA进行化学降解，然后用放射性元素 $[\alpha^{32P}]$ 或 $[\gamma^{32P}]$ 标记DNA片断的单侧末端，一个末端标记的DNA片断在5组互相独立的化学反应中分别得到部分降解，其中每一组反应特异地针对某一种或某一类碱基，因此生成5组放射性标记的分子，从共同起点（放射性标记末端）延续到发生化学降解的位点。每组混合物中均含有长短不一的DNA分子。此后，各组均通过聚丙烯酰胺凝胶电泳进行分离，再通过放射自显影来检测末端标记的分子。

McConnell 关系式 McConnell's relation 在ESR谱中，由于自旋极化引起氢原子核上出现不成对电子自旋

密度，与具有不成对电子的碳原子相连的氢核也显示出超精细耦合。因此由碳原子上的不成对电子自旋密度 ρ_c 可以直接估算该氢原子的超精细耦合常数 A_H。

$$A_H = Q^H_{CH}\rho_c$$

这个公式即 McConnell 关系式。Q^H_{CH} 是比例常数，由实验确定，根据不同情况一般取 22.5 ~ 33G。例如，一般对于正或负离子自由基 Q^H_{CH} 取 29G，而对于苯负离子自由基 Q^H_{CH} 取 22.5G。

McLachlan 近似　McLachlan approximation　计算自旋密度的方法很多，最简单的就是休克尔（Hückel）近似的分子轨道法。休克尔法只用未偶电子占有的分子轨道（spin occuppied molecular orbital，SOMO）计算自旋密度，不可能得到负的自旋密度。McLachlan 近似是在休克尔法的基础上考虑了所有占有分子轨道上的不同自旋的相互影响。在 McLachlan 近似中，在最初求得的分子轨道中放入 α 自旋，然后考虑其影响效果再求 β 自旋所占据的分子轨道。这样，在休克尔法中一对电子（一个 α 自旋和一个 β 自旋）占据完全一样的分子轨道，而在 McLachlan 法中同一对电子中的 α 自旋与 β 自旋的分子轨道是不同的。当某一原子上的 β 自旋的密度大于 α 自旋密度时，就会出现负的自旋密度。

Mie 散射　Mie scattering　光投射到浑浊介质上时，若介质中混杂的微粒尺度比入射光波长稍大时发生的光散射称为 Mie 氏散射。德国米（Mie）教授根据经典电磁场理论对球形、链形微粒推导出米氏散射理论。在 Mie 散射中各散射点的位相密切相关，因此散射光强度会随散射角的变化而出现一系列极大值与极小值，前向（入射光投射方向）与后向散射光强度较大。若散射微粒尺度比入射光波长大很多时，米氏散射强度分布将逐渐过渡到通常的基尔霍夫（Kirchhoff）衍射花样。测定米氏散射光强的角分布，可获得散射粒子的形状和结构信息。

MLEV-16 脉冲系列　MLEV-16 pulse sequence　由 H. H. Levitt 首先提出来的多脉冲去耦方法。自旋耦合体系 CH 可以用单个 180°脉冲对 ^{13}C 进行去耦，但只有在 ^1H 受 90°脉冲作用后并当耦合重聚的时刻及其附近才有较好的效果。若用 n 个 180°脉冲，间隔又足够小，便有 n 个重聚时刻。当重聚时刻间距足够小时，可认为整个作用时间内对 ^{13}C 皆去耦。使用多脉冲时由于实验脉冲不完善性引起的误差，最终会累积起来，为此改用组合脉冲和相位循环造成完善的脉冲。这样将组合脉冲 $\boldsymbol{R}$（即 $90^\circ_x 180^\circ_y 90^\circ_x$）或者它的反相脉冲 $\overline{\boldsymbol{R}}$（即 $90^\circ_x 180^\circ_y 90^\circ_x$），代替单个 180°脉冲，将这样的 180°组合脉冲每 4 个构成一个循环：$\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\overline{\boldsymbol{R}}$，或 $\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}$，或 $\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}$，或 $\overline{\boldsymbol{R}}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}$，便成为 MLEV-4（脉冲）序列。将它们组合成更大的循环：$\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\overline{\boldsymbol{R}}\overline{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}$，便是 MLEV-16 脉冲序列。在相

同去耦场强下该法去耦效率优于调制法。该序列可以扩展得到更大的由 32～64 个基本元 R, $\bar{R}$ 组成的脉冲系列，去耦效果将更好。

Molisch 试验 Molisch text 糠醛和羟甲基糠醛能与某些酚类作用生成有色的缩合物，如 α-萘酚与糠醛或羟甲基糠醛生成紫色。应用这一反应来鉴定糖的存在称为 Molisch 试验。

NMR 理论的密度算符（矩阵）方法 density operator (matrix) method of NMR theory 以统计量子力学为基础，用密度算符运动方程来描述核自旋体系的态，在各种物理量作用下随时间的演变的理论方法。它并不像经典方法直接处理可观测的磁化矢量，而是处理自旋体系的态-密度算符，再由密度算符求得最后观测的信号。用它来分析各种复杂脉冲序列作用下耦合网络的自旋动力学过程，可精确地预测多维谱谱峰，指导设计新的脉冲序列。

NMR 理论矢量模型 vector mode of NMR theory 在描述核自旋体系宏观磁化矢量运动的微分方程——Bloch 方程基础上，建立 NMR 理论的经典和半经典的矢量模型。经典矢量模型适用于无自旋耦合，无四极耦合的单自旋体系，它可以说明自旋进动、章动、自旋回波、弛豫时间的测量，一些组合脉冲，慢化学交换的测量和自旋成像等许多基本实验。对多能级体系中出现的极化转移等实验的解释，需要采用半经典矢量模型。矢量模型能给予简明、直观、易懂的物理模型便于人们接受。但对复杂的情况如二维谱、多量子相干等实验等很难用矢量模型来描述，需用统计量子力学方法，最基本的是密度算符（矩阵）方法来描述。

NMR 谱线宽 line width of NMR NMR谱线不是无限尖锐的线，而是有一定宽度的峰。NMR 谱峰线宽用吸收峰最大高度一半处的宽度，即半高宽 $\Delta\nu_{\frac{1}{2}}$ 来表示。由核自旋体系的弛豫时间决定：$\Delta\nu_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\pi T_{总}}$ 或 $\Delta\omega_{\frac{1}{2}}=\frac{2}{T_{总}}$。大多数液体试样的典型线宽为 0.1～10Hz，聚合物 10～10^4Hz，固体则在 10^4～10^5Hz。参见**弛豫时间**条。

NMR 谱线形 line shape of NMR NMR 谱线具有一定峰形，可用线形函数 $G(\nu)$ 来描述它，它是归一化的。可以通过近似方法来拟合线形，最常见的线形有洛伦兹线形和高斯线形。洛伦兹线形 $G(\nu)=\frac{2}{[1+T_2(\nu-\nu_0)^2]}$ 对应的时域函数为 $g(t)=\left(\frac{1}{\pi}\right)\exp\left(-\frac{t}{T_2}\right), t\geqslant 0; g(t)=0, t<0$。高斯线形 $G(\nu)=2T_2\exp\left[\frac{-(\nu-\nu_0)^2T_2^2}{\pi}\right]$ 对应的时域函数为 $g(t)=\left(\frac{1}{\pi}\right)\exp\left(\frac{-\pi t_2}{4T_2^2}\right), t\geqslant 0; g(t)=0, t<0$。液体试样的 $T_1>T_2$，线宽主要由核的自旋-自旋弛豫时间 T_2 决定。通常液体 NMR 谱线属于洛伦兹线形，而固体

NMR 谱常常既不是洛伦兹线形，也非高斯线形，可用 Weibull 函数描述其时域函数：$g_{w}(t)=\left[\exp\left(\frac{-t}{T_{C}}\right)^{E}\right]$，系数 E 随温度在 1 与 3 之间变化，$E=1$ 为洛伦兹形，$E=2$ 为高斯线形。洛伦兹线形是中心较陡峭，底部扩展很宽，高斯线形则峰尖部比较平坦，但底部要比洛伦兹线形窄得多。

NMR 谱仪磁场系统 magnetic field system of NMR 用以产生一个强、稳、匀的静磁场。2.3Tesla 以下的强磁场通常用电磁铁或永久磁体来产生，而更高的磁场则需采用超导体绕成螺旋形线圈电激励来产生。为了获得稳定磁场强度 B_0，对于超导磁体务必用液氦、液氮维持其正常工作。对于电磁铁磁体，除了要有水冷却系统使磁体恒温，对供电电源要求稳压外，还采用磁通稳定器（包括拾磁线圈与补偿线圈）用以消除变化较快的磁场干扰，但只能保证短时期内的稳定，长时间发生的磁场的漂移则还要采用场频联锁装置，它是利用某参考核（比如重水中的氘核）的一条强核磁共振色散信号，设计反馈电路可自动反向地补偿并消除变化较慢的磁场干扰，维持磁场的长期稳定性。谱仪中常有内锁和外锁之分，所谓内锁通常是利用试样中某氘代溶剂的氘的共振信号来进行锁场，而外锁则是利用固定在离被测试样很近的位置上的某核（如 ^{2}D，^{7}Li，^{19}F，…）的共振信号进行锁场。内锁方式测量，稳定度更高，准确度更高，但每更换试样就会失锁，要重行锁场。在磁隙内要插入多组匀场线圈调节其电流使它在空间构成互相正交的梯度磁场，可补偿主磁体的磁场不均匀性。

NMR 谱仪接收检测系统 receiver and detection system of NMR 当射频脉冲施加在试样上后，射频发射门是关闭的，NMR 的自由感应衰减（FID）信号通过，启开接收机门，由接收检测系统接收下来。经前置放大（在探头部分），进入混频器变为中频，经放大进入单相相敏检波（PSD）或数字正交检波（DQD）系统，低放、滤波，所得到的模拟信号经模数（A/D）转换器转化成为数字信号由计算机进行快速采样将 FID 信号记忆下来。

NMR 谱仪灵敏度 sensitivity of NMR spectrometer 表示仪器检测弱信号的能力。NMR 谱仪的信噪比为

$$\frac{S}{N}\propto\frac{N\gamma^{\frac{5}{2}}I(I+1)B_0^{\frac{3}{2}}\phi Q^{\frac{1}{2}}V_C^{\frac{1}{2}}}{T^{\frac{3}{2}}f^{\frac{1}{2}}b^{\frac{1}{2}}}$$

式中，N 是单位体积中核的数目；γ 是核的磁旋比；I 是自旋量子数；B_0 是外加静磁场强度；ϕ 是探头的填充因子；V_C 是线圈体积；Q 是射频谐振回路的品质因子；T 是绝对温度；f 是接收机噪声因子；b 是接收机频带宽度。一般认为频率较低时 $\frac{S}{N}\propto N\gamma^{3}B_0^{2}$，而频率较高时 $\frac{S}{N}\propto N\gamma^{\frac{11}{4}}B_0^{\frac{7}{4}}$。提高灵敏度有效的办法是提高磁场强度；应用双共振技术，如极化转移、交叉极化，可提高 γ 值小的核的灵敏度；增

加被测试样的数量（如液体样品的浓度）；进行信号累加，每累加 n 次信噪比可提高 $\sqrt{n}$ 倍。

NMR谱仪射频发射系统 radiofrequency transmitter system of NMR 将一个稳定的、已知频率的"主钟"（石英晶体振荡器）产生的电磁波，经频率综合器可精确的合成出欲观测核（如 ^{1}H、^{13}C 或 ^{31}P，…等）、被辐照核（如 ^{1}H，供消除对观测核的耦合作用，以便简化谱图之用等）及锁定核（如 ^{2}D 或 ^{7}Li 等供稳定谱仪自身的磁场强度之用）的3个通道所需频率的射频源。射频源所发生的射频场经过受到脉冲程序控制的发射门，产生相应的射频脉冲，再经过功率放大能发射很强功率的多种射频脉冲，最终输送到探头部分绕在试样套管上的发射线圈上。

NMR谱仪探头 NMR probe-head 整个仪器的心脏，是联系试样与谱仪的接口，固定在磁极间隙中间。常备有多种探头组件和插件，这些组、插件中除了有放置样品管的支架及驱使样品旋转的系统外，还装有向样品发射射频场的发射线圈和用于接收共振信号的接收线圈，实际上常采用单一线圈分时间先后兼作射频的发射和接收之用。对于不同的核种所施加的射频波可经过波段选择及调谐来实现的。线圈中央插入装有试样的样品管，样品管外套上转子，在压缩空气的驱使下使样品管旋转起来，以消除垂直于样品管轴向的平面内的磁场的不均匀性，也用以控制样品的温度。

用于液体高分辨谱的探头有：单频（^{1}H 核）和双频（^{1}H，^{13}C 核）的；有四核（^{1}H，^{31}P，^{13}C，^{15}N 或 ^{19}F）的；有多核（从 ^{109}Ag 到 ^{31}P 及 ^{1}H）的，除了个别共振频率极低的核以外几乎包括了所有可观测的核。有反向探头，通常用于间接检测，主要用于 ^{1}H 检测的极化转移实验和异核相关谱，利用它可使不灵敏核的灵敏度大大提高。有三共振或四共振探头，在观察某核时可同时照射其他2种或3种核以便简化图谱或获取某些特种信息。有专作CIDNP实验的探头。有作高温（试样高达450℃）和低温实验用的探头。有带有射频梯度线圈的探头，可使NMR信息的效率大幅度地提高等。有多种微量探头，用于亚微克数量级的分析。有应用于生物学的高分辨魔角旋转（MAS）探头。有适合于作MAS的腔体宽度不同的探头。有与MAS相配合具有极化转移（CP）和高功率去耦用的多核(X)/^{1}H 探头。固态宽线NMR谱仪中则具有宽带高功率探头及交叉极化探头等。

NMR谱仪信号处理与控制系统 signal treatment and control system of NMR 利用键盘或光笔操作系统实现人机对话，控制协调系统有条不紊地工作。由计算机指挥脉冲程序发生器，控制射频的发射与信号的接收等。模数（*A/D*）数模（*D/A*）转换器用以实现数字量与模拟量之间的相互转化。经 *AD* 转化后的时域数字信号，由计算机按离散的快速傅里叶变换转化为频谱，计算机按相应软件指

令还对数字化信息进行种种必要的数据处理。为提高仪器的使用效率，常设有前后台（FG/BG）系统，前台可直接用于当时被测试样的累加测量，而后台则可同时对已获得的 NMR 信息作数据处理。

NMR 谱仪主要技术指标 main specification of NMR spectrometer 表征 NMR 谱仪特性的技术主要参数。电磁体脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪（≤100MHz 者）的主要技术指标有灵敏度、分辨率、90°射频脉冲宽度，磁场的短期和长期的稳定性以及旋转边带。超导脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪（≥200MHz 者）类似于电磁铁的谱仪。不同探头插件有不同指标，不同场强的谱仪指标有所不同，场强越高一般技术指标越高。不同公司的产品的指标也略有不同。

NMR 时标 NMR time scale NMR 是核能级跃迁现象。核的磁能级在 μeV 数量级或更小，共振频率约在 10^9 Hz 之内，激发态的平均寿命约大于 10^{-9} s。因此 10^{-7} ~ 10^{-9} s 便是 NMR 的时标。对于快于 NMR 时标的事件，用 NMR 来观测得到的是所有这些快事件过程的叠加，而对于慢于该时标的事件，则可观测到该事件的瞬时行为。紫外可见光的时标在 10^{-14} ~ 10^{-15} s、红外在 10^{-12} ~ 10^{-14} s，因此它们可用于观测更快速的事件，而 NMR 用以观测较慢的事件。

NMR 中的饱和现象 saturation in NMR 在外加静磁场作用下，磁性核自旋状态去简并，出现若干分裂的塞曼能级，粒子在各能级上的布居数仅稍有不同，在低能态上的粒子数仅占极其微弱的多数。核磁共振吸收恰恰是依靠这极其微小差额的核吸收射频场 $\boldsymbol{B}_1$ 的辐射能而被检测出来。当体系吸收了足够强的射频场 $\boldsymbol{B}_1$ 的辐射能，低能态粒子便跃迁到高能态上，体系处激发态，体系继续吸收 $\boldsymbol{B}_1$ 的辐射能直至相邻能级上的粒子数相等。根据爱因斯坦辐射理论，能级间距如此小的激发态体系的自发辐射的几率几乎为零，高能态不便通过此渠道恢复到基态。这时若无其他释放能量过程，体系不再呈现净吸收，也就不能测得核磁共振信号，称此现象为饱和。

Nyguist 频率 Nyquist frequency 见取样定理条。

(2nI+1)规律 (2nI+1) rule 当一个核与磁量子数为 I 的几个等同的核相耦合时，其谱线被分裂成 $(2nI+1)$ 条，强度由耦合核的自旋状态的数目而定。耦合核 $I=\frac{1}{2}$ 时，便成为 $(n+1)$ 规则。当 $I=1$ 时（如 ^{2}D 核），被耦合核的分裂数应按 $2n+1$ 计，其强度如下：$n=1$ 时，被分裂成强度1∶1∶1的三重峰；$n=2$ 时，被分裂成强度为1∶2∶3∶2∶1的五重峰；$n=3$ 时，被分裂成1∶3∶6∶7∶6∶3∶1的七重峰……。这是简单耦合谱谱峰裂分及裂分峰的强度的一般的规律。参见 $(n+1)$ 规则条。

(n+1)规律 (n+1) rule 当一个

核与n个磁等同的$I=\frac{1}{2}$的核相耦合时，其谱线被分裂成（$n+1$）条，强度按二项式展开的系数比，$n=1$时，被分裂成强度比为1：1的双峰；$n=2$时，被分裂成强度比为1：2：1的三重峰；$n=3$时，被分裂成强度比为1：3：3：1的四重峰……。这便是耦合裂分峰的（$n+1$）规则。此规则只适用于$I=\frac{1}{2}$核的简单耦合体系。

Ogston 模型 Ogston model 描述带电大分子通过高聚物网络迁移行为的一种理论模型。假设基质由互相连接的无规则的网络所组成，它的空隙平均孔径为ξ，迁移的溶质就像是一个半径为R_g的不变形粒子。因此，较小的分子迁移得较快，因为对较小的分子有更多的孔隙可以利用。该模型假设迁移粒子是不变形的球形粒子，当$R_g>\xi$时，该模型不适用。

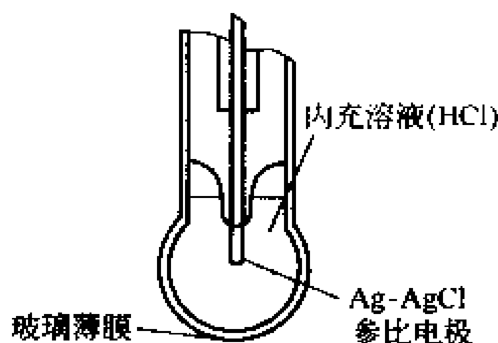
PAR 衍生化法 PAR derivatization 多数无机离子对紫外-可见光无吸收，不能直接用光度检测器检测。若在分离柱后连续地加入显色剂使这些离子生成带有发色基团的衍生物，即可用光度法来检测。以PAR（吡啶偶氮萘酚）作显色剂用于柱后衍生所能检测的金属离子限于锰、铁、钴、镍、铜、锌、镉、铅和镧系元素。

Pauly 反应 Pauly reaction 酪氨酸的酚基可以与重氮化合物（例如对氨基苯磺酸的重氮盐）结合生成橘黄色的化合物（Pauly 反应），利用这一特性可以检测酪氨酸。

PDF 粉末衍射卡片 PDF powder diffraction file cards 由国际粉末衍射标准联合会（JCPDS）负责编辑出版的标准粉末衍射卡片。到1998年为止，数据库中已经含有11.7万张标准卡片，每一张PDF卡片列出一种单相物质（包括元素、合金、无机化合物、矿物、有机化合物和金属有机化合物）的X射线多晶衍射数据，并在卡片的右上角标有一个表示数据质量的符号，分别是：★（高质量实测数据），C（根据晶体结构参数计算而得的理论数据），I（衍射图已指标化，数据可靠），Q（数据质量符合要求），D（已被质量更高的卡片所替代）。PDF卡片是进行物相鉴定的重要依据。目前已有光盘版发行，可根据实测的多晶X射线衍射图谱自动进行物相检索。

pH 玻璃电极 pH glass electrode 对溶液中氢离子的活度具有选择性响应的玻璃电极。玻璃电极由一种特殊类型的玻璃制成球泡状的敏感膜，球内盛有内充液（0.1 $mol\cdot L^{-1}$ HCl 或pH 7的含有氯离子的磷酸盐缓冲溶液），内参比电极为Ag/AgCl电极。由于pH电极的膜电位随被测溶液中氢离子的活度而变化，因而通过pH响应膜电位可以测定出溶液中氢离子的活度。pH玻璃电极不受溶液中氧化剂、还原剂及其他活性物质的影响，可在浊性、有色或胶体溶液中使用，少量的溶液即可进行pH测定。缺点是球泡极薄、易碎及阻抗太高需配合高阻抗电位计才能使用。

pH 电极 pH electrode 亦称 pH 玻璃电极。用于测量溶液 pH 值的指示电极。其结构如下图所示，其主要部件为玻璃管下部的玻璃泡，泡的下半部为特殊玻璃制成的薄膜，厚度约 30 ~ 100μm。管内装有一定 pH 值的缓冲溶液作内参比溶液和一支银-氯化银电极作内参比电极。使用前 pH 玻璃电极必须先进行活化（去离子水中浸泡 24h 以上），使用时与饱和甘汞电极组成电池，并用标准 pH 值缓冲溶液进行校正后方可用于待测溶液 pH 值的测定。



pH 缓冲溶液 pH buffer solution 一种能抵抗外加少量强酸、强碱或稀释的影响，而本身 pH 值不发生显著变化的溶液。它是分析化学中最重要、应用最广泛的一类缓冲溶液，通常由弱酸及其共轭碱（如 HAc-Ac^-，NH_4^+-NH_3 等）或多元酸的共轭酸碱对（如 Na_2CO_3-$NaHCO_3$，NaH_2PO_4-Na_2HPO_4 等）组成。

pH 梯度动态分离 dynamic separation of the pH gradient 在毛细管区带电泳装置中，控制由电极池进入毛细管中的 H^+ 离子的流动速率，在毛细管中产生 pH 梯度。采用 pH 梯度方法，有可能将那些在一种 pH 值下难于分离的复杂样品得到完全和快速分离。

pH 值梯度洗脱 pH gradient elution 在液相色谱分离过程中改变流动相 pH 值，使分离得以改善的色谱分离操作技术。

pL 缓冲溶液 pL buffer solution 即配体缓冲溶液（L 指配体）。此概念首先由 Tanaka 提出，由大量金属离子 M（抗路易斯碱成分）和其配合物 ML（抗路易斯酸成分）组成的溶液。由于存在平衡（省略电荷）



$$M + L \rightleftharpoons ML$$

$$K_{ML} = \frac{[ML]}{[M][L]}$$

当向溶液中加入少量路易斯酸与溶液中 L 络合时，ML 立即解离，平衡向左移动；或当向溶液中加入少量路易斯碱时，溶液中的大量抗碱成分 M 立即与其络合，从而使溶液 pL 值都不会发生明显变化。由于 L 与 H^+ 间的反应，实际工作中要考虑 pL 缓冲溶液适宜的 pH 范围。

pM 缓冲溶液 pM buffer solution 即金属离子缓冲溶液（M 金属离子）。当溶液中有大量配体 L（抗路易斯酸成分）与大量的配合物 ML（抗路易斯碱成分）组成 L-ML 型缓冲溶液时，若向溶液中加入少量路易斯酸、碱，可以维持溶液中的 M 浓度不变，其原理与 pL 缓冲溶液相同。参见 **pL 缓冲溶液**条。

p*X* 值 p*X* value 分析化学中常遇到数值很小的数字 *X*，如某离子的平

衡浓度，某种酸(碱)的酸(碱)性常数等，为方便使用，常用 pX 来表示这些数值，其定义为 $pX = -\lg X$，即将 X 取负对数。例如某溶液 $[H^+] = 2.0 \times 10^{-4} mol \cdot L^{-1}$，则其 pH = 3.70；某酸的酸性常数 $K_a = 6.0 \times 10^{-10}$，则 $pK_a = 9.22$。其他类同。

Q 因子 Q-factor ESR 波谱仪的微波谐振腔集中微波功率的效率取决于它本身的 Q 值（也叫腔的品质因数）。Q 因子的定义为

$$Q = 2\pi \frac{\text{腔内储存的能量}}{\text{每周期损耗的能量}} = \omega \frac{\text{腔内储存的能量}}{\text{损耗的功率}}$$

如果只计腔内壁电阻所引起的损耗，则上式的 Q 值称为“无载 Q 值”，用 Q_0 来表示；如果上式分母包括了腔体本身以及通过耦合孔所引起的外界负载的总损耗，则上式称为“有载 Q 值”。微波谐振腔的 Q_0 可达 10000 左右。当放入样品时，Q 值会降低一些。谐振腔的 Q 值越高，波谱仪的灵敏度也越高。

Redfield 法 Redfield method 一种选择性激发的方法。有 Redfield 零点法和 Redfield 21412 脉冲。当信号峰位于溶剂峰的一侧时，它们可以把溶剂峰置于零激发区域，以抑制溶剂峰。Redfield 零点法是在采集 FID 信号时施加一个强度为 $\boldsymbol{B}_1$ 长度为 τ 的弱射频脉冲，在与发射频率之差为 $\frac{1}{\tau}$ 处落在溶剂峰上。Redfield 21412 脉冲是由脉冲宽度比为 2∶1∶4∶1∶2，总长度为 τ 的脉冲序列。其中窄脉冲的相位与其他两种较宽脉冲的相位相反。在与发射频率之差为 $\frac{1}{\tau}$ 处落在溶剂峰，因不能激发而被消除。为了精确地消除溶剂峰，所有脉冲宽度皆可变，但它们的比值不能变。Redfield 21412 脉冲法的零激发区略宽但陡度较小，更稳定。

Reitveld 修正 Reitveld refinement 利用粉末衍射数据进行全谱拟合，测定晶体结构的方法。全谱拟合就是按一定的理论和晶体结构模型计算研究对象的粉末衍射谱图，将计算而得的谱图与研究对象的实测粉末衍射谱图相比较后，修改计算模型中的某些晶体结构参数，使计算谱与实测谱尽可能地接近，重复执行这一系列的操作，直到计算谱和实测谱的吻合程度令人满意时为止，计算谱图时所用的最终晶体结构模型即可认为是研究对象的实际结构。

RNA 病毒 RNA virus 具有 RNA 基因组的病毒，有 4 种类型：（1）以正链 RNA 为基因组者；（2）以负链 RNA 为基因组者；（3）以双链 RNA 为基因组者；（4）逆转录病毒，其 RNA 作为 RNA 依赖性的 DNA 聚合酶的模板。

RNA 剪接 RNA splicing 从原始 RNA 转录物中切除某些序列连接起来以便产生成熟的 mRNA、tRNA 和 rRNA 的过程。剪接作用发生在细胞核、线粒体或叶绿体中。在高级真核生物中，mRNA 的成熟需经过内含子的切除和外显子的拼接等步骤。剪接

过程涉及酶促作用、核内小分子量RNA的参与及剪接前的一些加工步骤。

RNA聚合酶　RNA polymerase　能以DNA为模板，催化由4种核糖苷三磷酸（NTP）底物合成RNA链的酶。在原核细胞中，RNA聚合酶由5种亚基组成，具备5种亚基者称为全酶，写为β′、β、α_2、ω、σ，除σ亚基之外的部分（β′、β、α_2、ω）称为核心酶。核心酶本身即具有催化活性。β′亚基的功能是负责与DNA结合，β亚基负责RNA链的合成，σ亚基负责识别启动子和起始转录，α_2和ω亚基的具体功能尚不太清楚。除ω亚基外，其他亚基的基因均已被克隆。这些基因均存在于3个操纵子中，这些操纵子中还含有别的一些基因。例如，σ操纵子中含有复制所需的DNA引物酶的基因。这些操纵子中基因并不机会均等地转录。在真核细胞中，RNA聚合酶有3种，分别命名为RNA聚合酶Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ。RNA聚合酶Ⅰ定位于核仁。催化转录的产物是rRNA，占RNA聚合酶总活性的50%～70%。RNA聚合酶Ⅱ位于核浆，负责转录hnRNA，占聚合酶总RNA活性的20%～40%。RNA聚合酶Ⅲ位于核浆，负责合成核内小分子RNA和tRNA，占RNA聚合酶总活性的10%。RNA聚合酶Ⅲ催化转录的终产物是mRNA，故其为与遗传调节直接相关的酶，其功能最为重要和最受重视。这3种酶可用不同的转录抑制剂加以区分。

R吸收带　R absorption band　由德文Radikal基团得名，指由$n\rightarrow\pi^*$跃迁引起的吸收带，相当于在一端的生色基团（如 C═O，—NO_2，—N═N—，—N═O 等）的跃迁引起的吸收，与λ_{max}对应的摩尔吸光系数ε_{max}通常<100，是弱吸收带。

R心格子　R lattice　在三方晶系中可能出现的晶体点阵。可以划分为$a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma\neq90°<120°$的菱面体素晶胞（三重轴与晶胞的体对角线平行），也可以划分为$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$的六方复晶胞（三重轴与c轴平行）。六方复晶胞中含有三个点阵点，除了8个顶角上的点阵点之外，晶胞中（2/3，1/3，1/3）和（1/3，2/3，2/3）处还有两个附加的点阵点。

Scatchcard图　Scatchcard plot　求算用紫外-可见吸收光谱法测定体系的结合常数的重要方法之一。在底物S与配体L形成1∶1配合物的体系中，所测体系的吸光度$A=\varepsilon_S bS_t+\Delta\varepsilon_{11}b[SL]$，其中，$b$是光程；$S_t$为底物S的总浓度；$\varepsilon_S$是底物S的摩尔吸光系数；$\Delta\varepsilon_{11}=\varepsilon_{11}-\varepsilon_S-\varepsilon_L$，$\varepsilon_{11}$是1∶1配合物的摩尔吸光系数、$\varepsilon_L$是配体L的摩尔吸光系数。吸光度变化$\Delta A=A-A_0=K_{11}\Delta\varepsilon_{11}b[S][L]$，其中，$A_0$为只有底物时的吸光度；$K_{11}$为1∶1配合物的结合常数。单位光程吸光度的变化$\frac{\Delta A}{b}$与体系组成的关系为$\frac{\Delta A}{b[L]}=-K_{11}\frac{\Delta A}{b}+S_tK_{11}\Delta\varepsilon$。以

$\Delta A/[L]$-ΔA作图，由曲线斜率可求得结合常数 K_{tt}。

Schlieren 光学检测器 Schlieren optical detector 当平行光通过一个有折射率梯度的溶液时，产生折射，折射角度与池的厚度和折射率梯度的大小成正比，称为 Schlieren 效应。在沉降分离中，以 Schlieren 效应测量折射率梯度，从而测定不同位置物质浓度梯度，制成 Schlieren 光学检测器。超离心沉降法中，可用该检测器测定被分离物质的径向分布，从而获得分子量的径向分布的信息。通过比较复杂的光学检测与数据处理系统可以得到折射率与物质在池中位置的函数关系。此法测定的是浓度的梯度，而不是浓度。

Seliwanoff 反应 Seliwanoff reaction 用间苯二酚区分酮糖和醛糖的反应。间苯二酚与盐酸遇酮糖呈红色，遇醛糖呈很浅的颜色，根据这一特性可以区分酮糖和醛糖。

Shoolery 经验式 Shoolery empirical formula 一种对烷基氢 ^{1}H-NMR 化学位移的近似估算法。化学位移 $\delta(CH_3X;CH_2XY;CHXYZ) = 0.23 + \sum_{取代基}\Delta\delta$。取代烷基的质子，如在 CH_3X、CH_2XY、CHXYZ 中的取代基 X、Y、Z 的取代效应 $\Delta\delta$ 的经验值已列成表可查用。如 H—为 0.17，CH_3—为 0.47，—CH_2R（R 为烷基等有机基团）为 0.67，C ═C 为 1.32，苯基为 1.85，—Br 为 2.33，—OR 为 2.36，—OH 为 2.56，—F 为3.60 等。

Shpol' skii 效应 Shpol' skii effect 在低温下（<77K）正烷烃溶液形成的微晶基体中，多环芳烃荧光光谱变窄的现象。在正烷烃低温形成微晶过程中，溶质分子取代了少数溶剂分子而占据着特定的晶体位置，有严格的取向、其行为如同隔离的分子。只是因为其在固体溶剂中的微环境的有限差异，其取向有所不同，振动谱带尖锐。而且低温下热变宽作用小，得到的光谱半峰宽约为 $10cm^{-1}$ 的准线性光谱。Shpol' skii 效应的成立条件是溶质和溶剂分子的大小、键角相匹配。

SI 词头 SI prefix 用于构成 SI 单位的十进倍数与十进分数单位的词头。目前共有 20 个词头表示 10^{-24} 到 10^{24} 的倍数。SI 词头见附录Ⅳ。

由 SI 词头加 SI 单位构成 SI 单位的十进倍数与十进分数单位。SI 词头不得重叠使用，如不得使用 mμm，而应代之用 nm。

SI 单位 SI unit SI 基本单位与按一贯单位制原则导出的 SI 导出单位组成的单位。它与国际单位制单位是有区别的，国际单位制单位还包括了十进 SI 倍数和分数单位。

Southgate 改良法 modified Southgate method 一种测定膳食纤维的方法。样品用 58% 的甲醇回流提取，残渣加水加热，加入淀粉水解酶水解后，再加入 4 倍量的乙醇，离心分离的残渣即为膳食纤维。膳食纤维用热水抽提，提取液浓缩后加入乙醇，使其浓度达 80%，离心分离得水溶性非消化性多糖（水溶性膳食纤维，主要是水溶性果胶）沉淀，离心分

离，用0.5mol·L⁻¹硫酸回流2.5h，可测得己糖、戊糖、糖醛酸含量，计算出水溶性膳食纤维的含量。将热水抽提后的残渣用0.5mol·L⁻¹硫酸回流2.5h，水解水不溶性非纤维素多糖（主要为半纤维素），冷却后加入同体积乙醇，使乙醇含量达50%，离心分离，测定上清液中己糖、戊糖、糖醛酸含量，计算出水不溶性非纤维素多糖的含量。再将上一步离心分离出的残渣加72%硫酸，在0～4℃放置24h，使纤维素水解，在冰水浴中加水稀释，用古氏坩埚抽滤，测定清液中己糖、戊糖、糖醛酸的含量，计算纤维素的含量。古氏坩埚中的残渣（主要为木质素）用乙醇洗涤、风干、70℃干燥过夜，称重，扣除灰分后得到木质素的量。最后按下式计算膳食纤维百分含量：

膳食纤维百分含量＝水溶性非消化性多糖百分含量＋水不溶性非纤维素多糖百分含量＋纤维素百分含量＋木质素百分含量

己糖、戊糖、糖醛酸的含量用苯酚硫酸法、苔黑酚比色法、咔唑硫酸法分别测定，并按下式计算多糖的量：

多糖百分含量＝己糖百分含量×0.9＋戊糖百分含量×0.88＋糖醛酸百分含量×0.81

t分布 t-distribution 又称学生氏分布。是有限次测量数据的一种概率分布形式。1908年由英国统计学家W. S. Gosset提出，用来描述统计量$t=\frac{\bar{x}-\mu}{S_{\bar{x}}}$的概率分布。$t$分布的概率密度函数是

$$\varphi(t)=\frac{1}{\sqrt{\pi f}}\frac{\Gamma\left(\frac{f+1}{f}\right)}{\Gamma\left(\frac{f}{2}\right)}\left(1+\frac{t^2}{f}\right)^{-\frac{f+1}{2}}$$

$$(-\infty<t<\infty)$$

该分布关于$t=0$对称，在$t=0$概率密度达到极大，在$t=\pm\sqrt{f/(f+2)}$处有拐点，当$f\to\infty$，t分布趋向于标准正态分布。在实际使用中，当$f>30$，可用正态分布来近似t分布。在分析测试中，常用t分布来检验系统误差。

t检验 t-criterion; t-test 用服从t分布的统计量检验正态总体平均值。在分析测试中有着广泛的应用，可用来检验测定平均值与给定值是否相符合、两个平均值之间是否有显著性差异、成对测定平均值的一致性，估计总体平均值的置信区间，检查回归曲线的变动等。

T-2毒素 T-2 toxin 单端孢霉烯族化合物之一，是三线镰刀菌的代谢产物，化学名为4β,15-二乙酰氧基-8α-(3-甲基丁酰氧基)-12,13-环氧单端孢霉-9烯-α醇。T-2毒素的中毒现象，以拒食、呕吐、腹泻及诸多脏器出血和白细胞缺少为特征。中毒现象多发生于猪和家禽，为人、兽共患病。T-2毒素的检测方法有薄层色谱法、HPLC、酶联吸附免疫法、免疫亲和柱-荧光法、免疫亲和柱-HPLC法等。

Tobey-Simon经验式 Tobey-Simon empirical formula 一种对烯烃

氢^{1}H-NMR 化学位移的近似估算法。

$$\delta\left(\mathrm{H}\!\!>\!\!\mathrm{C}\!=\!\mathrm{C}\!<\right)=5.25+Z_{同碳}+Z_{顺式}+Z_{反式}\left(\begin{matrix}\mathrm{H} & & \mathrm{R}_{顺式}\\ & \mathrm{C}\!=\!\mathrm{C} & \\ \mathrm{R}_{同碳} & & \mathrm{R}_{反式}\end{matrix}\right)$$

，其中处于同碳位置、顺式和反式位置的取代基团 R 的取代效应分别为 $Z_{同碳}$、$Z_{顺式}$、$Z_{反式}$。各种取代基的经验参数有表可查，如对 H，三者皆为零，烷基依次为 0.45，－0.22，－0.28；Cl 有 1.08，0.18，0.13；芳基有 1.38，0.36，－0.07；F 有 1.54，－0.40，－1.02 等。

Tougaard 深度剖析法 Tougaard depth profile analysis method 1983 年 Tougaard 提出的一个全新的、快速的利用 X 射线光电子能谱（XPS）技术进行非破坏性深度剖析的方法。在固体材料某一深度的受激电子从固体内部逃逸到样品表面的过程中会产生能量损失，使谱峰的形状发生畸变。畸变的程度取决于电子在逃逸过程中的距离。利用这种现象，可以通过模型计算的方法，从谱峰的峰形变化中把元素深度分布的信息提取出来。这种现象也同样存在于俄歇电子能谱(AES) 中。

Trouton 规则 Trouton rule 1884 年，Trouton 提出一个经验规律，正常液体的摩尔蒸发焓 $\Delta H_{汽化}$ 与其正常沸点 T_b（压力为 101.325kPa 时的沸点）的比值近似为一个常数，即

$$\Delta H_{汽化}/T_b = 常数 = 92\mathrm{J\cdot K^{-1}\cdot mol^{-1}}$$

在恒温恒压下，平衡时

$$\Delta G = \Delta H_{汽化} - T_b\Delta S_{汽化} = 0$$

于是 Trouton 规则为

$$\Delta S_{汽化} = \Delta H_{汽化}/T_b = 常数$$

下表中列出了一些物质在 $p = 1.33\times10^4$Pa 时的沸点与 $\Delta S_{汽化}$ 值

物　质	N_2	O_2	Cl_2	戊烷	己烷
T_b/K	79	97	235	307	341
ΔS/(J·K^{-1}·mol^{-1})	91.5	95	112	110	110.6

物　质	CCl_4	苯	$SnCl_4$	Hg	Cd	Zn
T_b/K	347	351	385	627	935	1188
ΔS/(J·K^{-1}·mol^{-1})	111.4	114	113.1	112	123	125.5

可见 Trouton 规则仅是一个近似的规则。Trouton 规则可用于从已知沸点估算液体的蒸发焓，从而估算蒸馏所需最少热量。但对于高度有序性分子如含有氢键的液体，估算的误差比较大。如乙酸的 $\Delta S_{汽化}$ 为 57.7J·K^{-1}·mol^{-1}。

TTC 法 triphenyl tatrazolium chloride method 基于繁殖中的细菌细胞把无色的 TTC 还原成红色以快速检验牛乳中的抗菌素的一种方法。试验方法是：在被检验的牛奶中加入试验菌和 TTC(2,3,5-氯化三苯四氮唑)，培养一定时间后，如果有抗菌素或阻碍细菌发育的物质存在，试验菌不发育，TTC 不能还原，试验液为无色状态；与此相反，如无这些物质存在，试验菌繁殖，TTC 被还原，试验溶液变成红色。根据待测牛奶的着色情况判定是否有抗菌素存在。

X 射线 X-ray 波长（1pm～20nm）介于 γ 射线和紫外线之间的电磁波，是 1895 年由伦琴（W. C. Röntgen）首先发现的，又称伦琴射

线。通常由能量足够高的电子束轰击金属而产生，这样产生的X射线包含两种成分：（1）因金属使电子减速而产生的、波长连续变化的轫致辐射；（2）因原子内层轨道的电子跃迁而产生的、具有特定波长的特征谱线。

X射线干涉术 X-ray interferometry 利用X射线相继通过多块布拉格衍射晶体后产生的干涉现象来研究晶体缺陷和测量晶体基本参量的一种高精度测试技术。可用来观察晶体缺陷所引起的微小点阵参量失配（精确度达到 $\Delta d/d=10^{-8}$），晶体点阵中的微小角偏移（精度达到 10^{-8} 弧度），精确测定位错的伯格斯矢量。在晶体学基本矢量测量方面，用来精确测定X射线折射率、晶胞参数等基本参量。在计量学方面，可与光学干涉仪配合用作X射线波长的精确测定，以及利用晶体材料测定阿伏加德罗常数等。

X射线感光胶片 X-ray film 记录X射线实验结果的专用感光胶片。与普通的感光胶片相比，专用的X射线感光胶片的乳胶颗粒较粗、有时是双面涂敷的以提高胶片对X射线的感光灵敏度。目前，随着影像板（IP）、CCD（电荷耦合器件）等电子感光器件的普及使用，除医用领域外，已经很少使用感光胶片记录X射线实验结果。

X射线管靶材 target element in X-ray source 构成X射线管阳极面向阴极一面的金属元素。由于X射线是通过高电压加速下的电子束撞击靶面而获得的，所以X射线管发射的特征X射线就是靶材元素的特征X射线。此外，因供给X射线管的功率绝大部分都消耗在阳极材料的发热上，所以靶材一般都选用导热良好或熔点较高的金属。

X射线光电子能谱 X-ray photoelectron spectroscopy；XPS 是一种最常用的表面分析技术，别名为化学分析用电子能谱（electron spectroscopy for chemical analysis；ESCA）。当一束具有一定能量的X射线与原子发生相互作用时，光子的能量可以把原子轨道上的电子激发出来。通过测量激发出来的光电子动能以及光电子的信号强度随能量的分布就可以获得X射线光电子能谱图。样品表面发射的光电子能量仅取决于原子的电离轨道，因此可以用来对样品进行定性分析。其特点是可以一次分析除氢和氦以外的所有元素，是一种非常方便的定性分析方法。同时光电子信号的强度与元素的含量有线性关系，可以用来获取样品表面元素化学成分的信息。利用XPS的化学位移可以获得元素化学价态以及分子结构等方面的信息。XPS是一种表面分析方法，其采样深度在1～3nm之间。结合离子束技术，还可以对样品进行深度分析。最新的XPS谱仪具有很高的空间分辨率（小于3μm），可以进行元素和化学价态的面分布分析。

X 射线光源 X-ray source 进行X射线实验的仪器中，产生原始X射线的设备。一般由高压发生器、X射线管和控制系统所组成，X射线管又可分为封闭式的和可拆卸式的。一般封闭式X射线管的功率可达到3kW，而可拆卸的旋转阳极X射线管的功率可达到100kW。最强的X射线光源是同步辐射光源，与60kW旋转阳极X射线光源相比，同步辐射光源的亮度要高3～6个数量级。

X 射线激发俄歇电子 X-ray excited Auger electron 在X射线辐照下，原子轨道上的电子可以被激发产生光电子，而激发态的原子在退激发过程中，也可以产生俄歇电子的跃迁过程。在退激发过程中，较外层轨道的电子向内层轨道的正空穴填充，在此过程中必然伴随着能量的释放，从而使另一外层电子发生电离，此电子就是俄歇电子。激发出的俄歇电子的能量与激发所采用的X射线的能量无关，仅与激发过程中的原子轨道的能量有关。X射线激发俄歇电子与普通的电子束激发俄歇电子相比，其能量分辨率更高，信背比也较高，但信号强度相对较弱。在XPS（X射线光电子能谱）分析中经常视俄歇电子峰为干扰，与光电子相比，俄歇电子中包含有更多的化学信息。

X 射线计算机体层摄影术 computer tomography；CT 以X射线束从多个方向沿身体某一选定断层面进行照相，测定透过的X射线量，数字化后，经过计算得出该层层面组织各个单位体积的吸收系数，然后重建图像的一种技术，又叫X射线断层扫描。CT装置主要包括三个部分：（1）扫描装置，由X射线管和测量X射线透射强度的探测器所组成；（2）计算机，收集和存贮扫描装置测得的原始数据，对原始数据进行处理后重组图像；（3）图像显示装置。CT的结果影像清晰、直观，能对全身各个解剖部位进行检查。CT在基础医学研究和临床上有广泛的应用。

X 射线能谱分析 X-ray spectrometric analysis 以高能X射线辐照样品，可以从样品原子最内层轨道激发出电子。由此形成的缺少内层电子的激发态离子极不稳定，其外层电子迅速向内层空穴跃迁，同时发射另一能量的次级X射线。以上的退激发过程持续进行可得到不同线系的X射线。电子从不同外层向K层跃迁时所发射出的X射线称为K系X射线，其中K_α、K_β、K_γ等线分别产生于电子由L层、M层、N层向K层的跃迁过程。同理，L系X射线产生于电子从不同外层向L层的跃迁过程等等。对于轻元素，只能产生K系X射线；对于重元素则除了K系、L系X射线外，还可能产生其他X射线谱系，但出射的X射线的强度很弱。不同的X线系的能量不同，可通过能量色散的方式获得X射线强度随能量（以keV为单位）变化的能量

谱图。在能谱图上可以给出各种能量的特征 X 射线的强度和能量峰位置，它可以作为元素定量和定性分析的依据。

X 射线摄影术 X-ray radiography 利用人体中各种器官、组织对 X 射线的吸收能力不同，使通过人体受检部位的 X 射线在胶片上成像，显影后，进行诊断的技术。此法的优点是成像清晰，可作为永久性记录，缺点是工作繁琐，不能观察脏器的功能动态。X 射线摄影术是应用最广泛的医用 X 射线检查方法。

X 射线透视术 fluoroscopy 利用人体中各种器官、组织对 X 射线的吸收能力不同，使通过人体受检部位的 X 射线在荧光屏上形成明暗不同的影像，进行诊断的技术。此法具有简单易行，便于对组织、器官进行动态观察和多轴位观察等特点，缺点是不能记录影像、影像欠清晰，易漏诊微小病变等。此法主要用于胸部、腹部、四肢等部位的检查。

X 射线吸收（分析）法 X-ray absorption methods 记录和分析 X 射线吸收光谱以测定物质化学成分的分析方法。按照所依据的吸收原理和所用光源的差异可以分为：（1）多色 X 射线吸收分析法；（2）单色 X 射线吸收分析法；（3）X 射线吸收限光谱法。X 射线吸收分析法适用于分析各种状态（气态、液态或固态）的物质。因 X 射线的衰减只取决于样品中元素的种类及其含量，所以元素在样品中存在的状态不影响分析结果。与 X 射线荧光分析法相比，吸收分析法的基体效应较小，即样品中其他元素的存在对待测元素测定的影响小。

X 射线吸收近限结构 X-ray absorption near edge structure; XANES 在吸收限的高能侧，从吸收限到大约 30～40eV 的能量范围内，多原子气体或凝聚态物质的 X 射线吸收系数随入射 X 光子能量的增大而起伏振荡的精细结构。XANES 涉及的光电子能量较低，被周围原子散射的截面大，多重散射起着重要作用，不能简单地用傅里叶变换进行结构分析，需要根据各种可能的结构模型进行多重散射理论计算，然后与实验结果比较。XANES 含有受激原子附近的局域几何结构信息，原则上能用于测定中心原子周围的原子的种类、数目和间距，还可能得到周围原子的排列层次和键角等配位几何结构等信息。

X 射线吸收限 X-ray absorption edge 物质的质量吸收系数随入射 X 射线波长改变而变化的曲线上的突变点。在一般情形下，物质的质量吸收系数是随入射 X 射线波长的增加而增加的，但当波长增加至超过某些临界值时，质量吸收系数会突然下降而形成突变点。这些突变点的出现是因为随着波长的增加，X 射线光子的能量下降，当下降到不足以逐出吸收体中某一元素某一能级的内层电子时，就会引起质量吸收系数的突然下降，而这一

临界 X 射线的波长就被称为是该元素该能级的 X 射线吸收限。每一元素都有对应于各能级的吸收限，越靠近原子核的能级，其吸收限的波长越短，对同一能级而言，吸收限的波长随原子序数的增加而变短。

X 射线吸收限光谱法 X-ray absorption edge spectrometry 又称示差 X 射线吸收法（differential X-ray absorptiometry）。是根据 X 射线吸收限进行成分分析的 X 射线吸收分析法，由于各种元素的 X 射线吸收系数随波长的改变并非是平滑的，而是存在着吸收限，所以在样品的吸收光谱中，就可以观察到透射束强度的陡变。吸收限的位置（波长）可以作为定性分析的依据，而吸收陡变的大小则可以作为定量分析的依据。

X 射线小角散射 small angle X-ray scattering; SAXS 发生在直射光束附近几度范围内的一种相干散射现象。小角散射是对应于尺寸为 1 ~ 100nm 范围内电子密度的起伏与结构的一种散射，由于这样线度的颗粒不存在大范围内的周期结构，因此不产生布拉格衍射。通过测定样品的小角散射强度，不仅能研究颗粒的大小和形状，还可得到形变与再结晶过程的动态信息。其应用非常广泛，在金属与合金中常用于测定平衡固溶体中原子偏聚，过饱和固溶体中沉淀相的形状与大小，以及与母相的取向关系。在化学方面可测定载体催化剂的比表面，研究高聚物或填料的分散体系。在物理方面，对于非晶态结构的弛豫现象，可根据原子扩散、迁移、同类原子的偏聚情况等，获得非晶体内部亚微观结构范围的电子密度变化等信息。

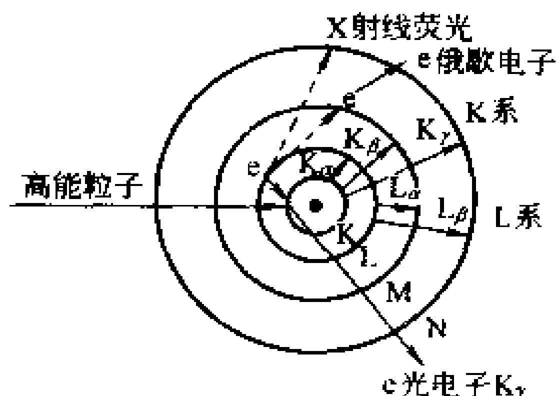
X 射线形貌学 X-ray topography 根据晶体的衍射衬度变化和消像规律，检查晶体材料及器件表面和内部微观结构缺陷的方法。衍射衬度主要来自于反映晶格错向的取向衬度和反映点阵缺陷的消光衬度。此法为非破坏性检验方法，具有样品制备方便、实验重复性好、能确定缺陷的性质等优点，被广泛应用于晶体材料完整性的研究。X 射线形貌术主要有 5 种实验技术：反射形貌术（巴格-巴瑞特技术），透射形貌术（兰氏技术），双晶形貌术，异常透射形貌术和同步辐射形貌术。

X 射线衍射法 X-ray diffraction 利用晶体对 X 射线的衍射效应进行分析测定的方法。根据晶体样品的状态，可以分为单晶 X 射线衍射法和多晶 X 射线衍射法。对于单晶样品，衍射法可以测定准确的晶体结构、手性晶体的绝对构型以及晶体样品的形貌等；对于多晶样品，衍射法可以进行物相分析，测定精确的晶胞参数、简单晶体的结构、样品的结晶度、织构、粒度、微晶的尺寸等。

X 射线衍射物相分析 phase analysis by X-ray diffraction 基于多晶样品的 X 射线衍射效应，对样品的物相组成、相含量等进行分析测定的方

法。每一种物相都有各自的“指纹”图谱，而混合物的衍射图则是组成该混合物各个物相的衍射图的叠加，所以根据实测衍射图的特征可以进行物相鉴定，根据各种物相的特征衍射的强度可以进行物相含量分析。迄今为止，最全的多晶衍射数据库是由JCPDS（joint committee on powder diffraction standards）编辑的《粉末衍射卡片集》（PDF），已经收集了超过11万张多晶衍射标准卡片，并出版有光盘版，可以利用各种索引，对实测多晶衍射图自动进行物相鉴定。

X射线荧光 X-ray fluorescence; XRF 高能量的离子束（光子、电子、质子）轰击原子，从原子内层驱逐出一个电子，在原子内层形成空穴，位于较高能级的电子随即在$10^{-12}\sim10^{-14}$s内自发跃入内层空穴，所释放的能量不在原子内被吸收而以辐射形式释放所产生次级X射线。如下图。如果激发X射线荧光的激发源是初级X射线，产生的荧光称为X射线荧光，如果激发源是质子和同步辐射，产生的X射线荧光分别称为质子诱导X射线荧光和同步



辐射诱导X射线荧光。X射线荧光的能量是特征的，等于两能级的能量差，而与入射辐射的能量无关。

X射线荧光分析（法） X-ray fluorescence analysis; XRF 基于X射线荧光波长与强度进行定性和定量的分析方法。莫斯莱发现，X射线荧光的波长λ取决于物质中原子的种类，随元素的原子序数Z的增加有规律变短，根据λ可以对物质定性。X射线荧光强度与量子效率、激发源强度、样品中被测原子的浓度、俄歇效应和基体效应等因素有关。在实验条件一定时，X射线荧光强度与样品中被测原子的浓度有关，根据其强度可以进行定量分析。常用的定量方法有标准工作曲线法、标准加入法、内标法。当获得标准样品有困难时，可利用数学方法估算分析结果，常用的数学方法有经验系数法和基本参数法。方法的特点是：不存在连续背景，有良好的检出限，检出限可达$10^{-7}g\cdot g^{-1}\sim10^{-9}g\cdot g^{-1}$；可测定的元素范围广，周期表中原子序数≥3的元素都可测定；重现性好；X射线荧光来自内层电子的跃迁，光谱简单，谱线干扰少；可测定元素的浓度范围宽，从常量到痕量都可测定；试样不受到破坏；分析速度快。缺点是仪器设备昂贵。根据激发源不同，可分为带电粒子激发X射线荧光分析、电磁辐射激发X射线荧光分析和电子激发X射线荧光分析。

X射线荧光光谱法 X-ray fluorescence spectrometry; XRF 记录和分

析X射线荧光光谱以测定物质化学成分的分析方法。当样品中的原子受到具有足够能量的电子束或X射线照射时，就会发射具有一定特征的X射线荧光，其中特征谱线的波长只与原子序数有关，而特征谱线的强度则与该元素在样品中的含量有关。测定特征谱线的波长和强度，即可确定试样中所含的元素及其含量。其特点是：不破坏样品的原有状态，分析范围广，除最轻的几种元素外都能分析；样品可以是固态或液态，不受元素价态的限制；谱线数目少，波长与原子序数关系简单，便于鉴定；快速简便，特别适用于稀土、铌和钽、锆和铪等不易分离元素的分析鉴定。以电子束直接轰击样品而使其产生荧光的分析方法叫做原级X射线荧光光谱法，以X射线照射样品而使其产生荧光的分析方法叫做次级X射线荧光光谱法。

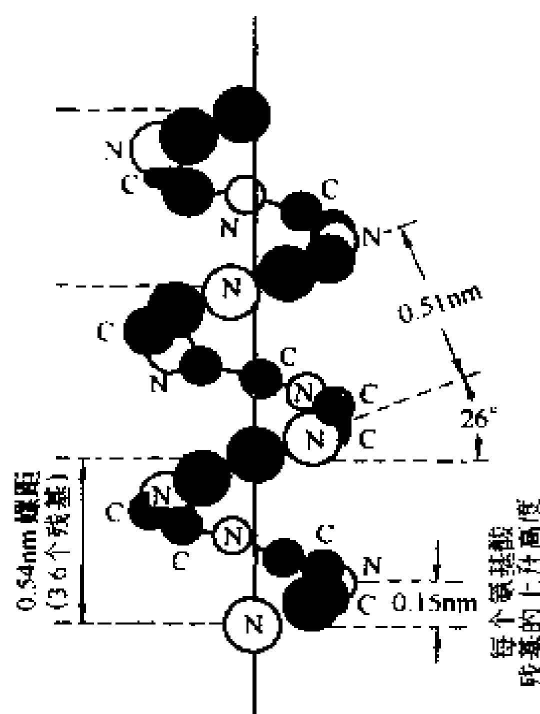
X射线诊断术 X-ray diagnosis 应用X射线的穿透性、荧光作用和感光作用，使人体内部器官和各种不同密度的组织在荧光屏或X射线胶片上显影，并根据人体解剖学、病理学、生理学、生物化学等基础医学知识，结合临床资料对疾病进行诊断的方法。

Zata电势 Zata potential 在电场作用下，固、液两相间的相对运动发生在紧密层与扩散层之间的滑动面上，此处的电势称为电动电势，即Zata电势。

Z形池 Z-form pool 将毛细管弯成“Z”形，增加光程，提高毛细管柱上检测的灵敏度。

α-甲胎蛋白酶免疫传感器 enzyme linked immunosensor of α-fetoprotein 以酶标记的甲胎抗体为固定化敏感成分而制得的传感器，α-甲胎蛋白的测定是临床鉴定甲肝的重要指标。

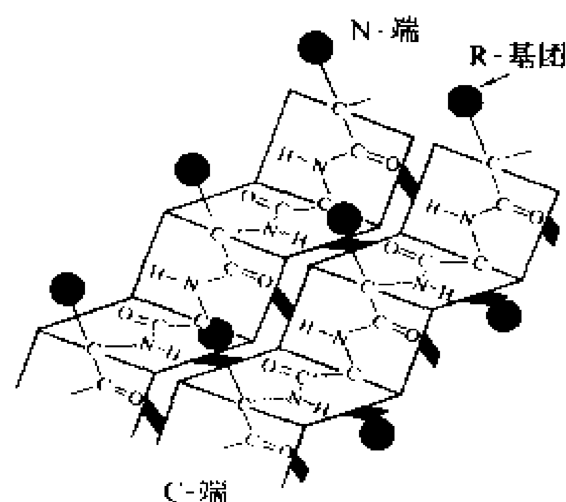
α-螺旋结构 α-helix 蛋白质主链的一种典型结构方式。动物毛中的α-角蛋白属于纤维蛋白质，这种蛋白质几乎全是α-螺旋结构。蛋白质二级结构中α-螺旋所占的含量可以通过红外和拉曼光谱的测定来算得。α-螺旋结构如下图所示。



β-胡萝卜素测定 determination of β-carotene content 脂质含量少的样品，用乙醚-石油醚（体积比=1:1）溶液抽提，脂质含量多的试料要进行皂化，取不皂化物溶于正己烷中。用氧化铝作固定相，用柱色谱法进行分离，除去正己烷-乙

醚（体积比 = 95:5）的洗脱馏分，收集正己烷-乙醚（体积比 = 75:25）的洗脱馏分，将洗脱物溶解于正己烷中，用分光光度计在 453nm 下进行比色测定。β-胡萝卜素还可用高效液相色谱法测定。

β-折叠结构　β-turn　蛋白质多肽链主链的折叠和盘绕方式称为蛋白质的二级结构。天然蛋白质二级结构之一为β-折叠结构，它与α-螺旋结构一起构成了蛋白质的有规结构。蛋白质二级结构中β-折叠所占的份额可以通过红外和拉曼光谱法来测定。β-折叠结构如下图。



β 质子耦合　β-coupling proton 很多碳中心自由基（如 CH_3—CH—OH）含有β质子，这些β质子与未偶电子之间的超精细耦合作用称为β质子耦合。β质子的各向异性超精细耦合常数一般都比较小，这是因为自旋间的偶极相互作用与两者间的距离的 3 次方成反比。而β位甲基上的质子的各向同性超精细耦合常数却较大，这是因为存在"超共轭作用"。这种作用和β质子的位置有关。设不成对电子所在 $2p_z$ 轨道与 C_β—H 键的夹角(二面角)为 θ，则β质子的各向同性超精细耦合常数与 $\cos^2\theta$ 成正比，这即是 $\cos^2\theta$ 规则。若甲基绕 C_α—C_β 键快速旋转，则角度影响被平均掉。

Δg 机理　Δ*g* mechanism　当生成单重态或三重态自由基对时，随着自由基对中两个未偶电子间距离 *r* 的增大，交换相互作用常数 *J* 减小，最终为零。理论上可以证明：若 $J=0$、$A=0$（自由基对内不存在超精细耦合作用）、$\Delta g\neq 0$（两个自由基的 *g* 值不等），当无外磁场时，单重态 |S> 不与三重态（| T_{-1} >、| T_0 >、| T_{+1} >）发生混合；但随着磁场强度的增加，| S > 与 | T_0 > 的混合增加，即单重态与三重态的系间窜跃速度加快。这就是 Δ*g* 机理，可用于解释自旋极化和化学反应的磁场效应。参见**自由基对机理**条。

π 堆积　π-stacking　指具有平面共轭双键结构的分子彼此靠近时产生的弱的分子间相互作用，尤指具有平面芳香环结构的分子之间堆积形成层状超分子时的分子间作用力。π 堆积常常包含了静电相互作用、偶极作用、范德华作用等多种分子间相互作用力。π 堆积在主、客体分子识别中人工受体的分子设计、超分子体系构建时被经常利用。DNA 双螺旋结构中核酸碱基对的重叠也包含了 π 堆积作用。

Σ_1 关系式　Σ_1 relationship　测定晶体结构的直接法中的相角关系式。

对于中心对称的空间群，可以表示为

$$s(2h,2k,2l) \approx s(hkl) \cdot s(hkl)$$

式中，s 表示相应结构因子的正负号；≈表示可能等于。此式表明：当结构因子 F_{hkl} 和 F_{2h2k2l} 的绝对值都很大时，不管 F_{hkl} 的符号是正还是负，F_{2h2k2l} 的符号都极可能是正的。因此，它在直接法中被用于推测 F_{2h2k2l} 的相角值。

Σ_2 关系式 Σ_2 relationship 测定晶体结构的直接法中的重要相角关系式。对于中心对称的空间群，可以表示为

$$s(hkl) = \sum_{h'k'l'} s(h'k'l')s(h-h',k-k',l-l')$$

式中，s 表示相应结构因子的正负号。此式是直接法中相角扩充过程的主要依据。

χ^2 分布 χ^2-distribution 数理统计中一种常用的概率分布，描述方差比 $\chi^2 = (n-1)\dfrac{S^2}{\sigma^2}$ 的概率分布特性，1990 年由皮尔逊提出。其概率密度函数为

$$\varphi(\chi^2) = \frac{1}{2^{\frac{f}{2}}\Gamma\left(\frac{f}{2}\right)}(\chi^2)^{\frac{f}{2}-1}e^{-\frac{1}{2}\chi^2}$$

$$(0 \leqslant \chi^2 \leqslant \infty)$$

式中，S^2 与 σ^2 分别是样本与总体的方差；$f=n-1$；n 是计算 S^2 的测量值的数目。在分析测试中，该分布可用来检验总体方差的变化，确定方差和标准偏差的置信区间等。

附　录

I. SI 基本单位

量的名称	单位名称	单位符号	量的名称	单位名称	单位符号
长度	米	m	热力学温度	开[尔文]	K
质量	千克(公斤)	kg	物质的量	摩[尔]	mol
时间	秒	s	发光强度	坎[德拉]	cd
电流	安[培]	A			

注：1. 圆括号中的名称，是它前面的名称的同义词，下同。
2. 无方括号的量的名称与单位名称均为全称。方括号中的字，在不致引起混淆、误解的情况下，可以省略。去掉方括号中的字即为其名称的简称。下同。
3. 本标准所称的符号，除特殊指明外，均指我国法定计量单位中所规定的符号以及国际符号，下同。
4. 人民生活和贸易中，质量习惯称为重量。

II. 包括 SI 辅助单位在内的具有专门名称的 SI 导出单位

量的名称	SI 导出单位		
	名称	符号	用 SI 基本单位和 SI 导出单位表示
[平面]角	弧度	rad	$1\ rad = 1 m/m = 1$
立体角	球面度	sr	$1\ sr = 1 m^2/m^2 = 1$
频率	赫[兹]	Hz	$1\ Hz = 1 s^{-1}$
力	牛[顿]	N	$1\ N = 1 kg \cdot m/s^2$
压力,压强,应力	帕[斯卡]	Pa	$1\ Pa = 1 N/m^2$
能[量],功,热量	焦[耳]	J	$1\ J = 1 N \cdot m$
功率,辐[射能]通量	瓦[特]	W	$1\ W = 1 J/s$
电荷[量]	库[仑]	C	$1\ C = 1 A \cdot s$
电压,电动势,电位,(电势)	伏[特]	V	$1\ V = 1 W/A$
电容	法[拉]	F	$1\ F = 1 C/V$
电阻	欧[姆]	Ω	$1\ \Omega = 1 V/A$
电导	西[门子]	S	$1\ S = 1 \Omega^{-1}$
磁通[量]	韦[伯]	Wb	$1\ Wb = 1 V \cdot s$
磁通[量]密度,磁感应强度	特[斯拉]	T	$1 T = 1 Wb/m^2$
电感	亨[利]	H	$1\ H = 1 Wb/A$
摄氏温度	摄氏度	℃	1 ℃ = 1K
光通量	流[明]	lm	$1\ lm = 1 cd \cdot sr$
[光]照度	勒[克斯]	lx	$1\ lx = 1 lm/m^2$

Ⅲ. 由于人类健康安全防护上的需要而确定的具有专门名称的 SI 导出单位

量的名称	SI 导出单位		
	名称	符号	用 SI 基本单位和 SI 导出单位表示
[放射性]活度	贝可[勒尔]	Bq	$1\ Bq = 1s^{-1}$
吸收剂量 比授[予]能 比释动能	戈[瑞]	Gy	1 Gy = 1 J/kg
剂量当量	希[沃特]	Sv	1 Sv = 1 J/kg

Ⅳ. SI 词头

因数	词头名称		符号	因数	词头名称		符号
	英文	中文			英文	中文	
10^{24}	yotta	尧[它]	Y	10^{-1}	deci	分	d
10^{21}	zetta	泽[它]	Z	10^{-2}	centi	厘	c
10^{18}	exa	艾[可萨]	E	10^{-3}	milli	毫	m
10^{15}	peta	拍[它]	P	10^{-6}	micro	微	μ
10^{12}	tera	太[拉]	T	10^{-9}	nano	纳[诺]	n
10^{9}	giga	吉[咖]	G	10^{-12}	pico	皮[可]	p
10^{6}	mega	兆	M	10^{-15}	femto	飞[母托]	f
10^{3}	kilo	千	k	10^{-18}	atto	阿[托]	a
10^{2}	hecto	百	h	10^{-21}	zepto	仄[普托]	z
10^{1}	deca	十	da	10^{-24}	yocto	幺[科托]	y

Ⅴ. 分析化学常用缩写词

2DCOSY-ESR 二维相关电子自旋共振谱
2D-ELDOR 二维电子-电子双共振
2D-ESEEM 二维电子自旋回波包络线调制
2D-SECSY 自旋回波相关二维谱
3D-HNCO 三维 HNCO 谱
3D-NMR 三维核磁共振谱
AA 活化分析
AAS 原子吸收光谱法
AD 抗原决定簇
ADI 每日允许摄入量
ADP 腺苷二磷酸
ADSV 吸附（溶出）伏安法
AE 出现能量
AEC 阴离子交换色谱法
AES 俄歇电子能谱
AES 原子发射光谱
AFID 碱火焰电离检测器
AFS 原子荧光光谱法
AMP 腺苷（一磷）酸
AMS 加速器质谱仪
ANN 人工神经网络

续表

AOAC	官方农业化学家协会（美）	CD-RTP	环糊精诱导室温磷光法
AOTF	声光可调滤光器	CEA	癌胚抗原
APCI	大气压化学电离	CEC	阳离子交换色谱法
APFIM	原子探针场离子显微镜	CE-MALDI-MS	毛细管电泳基质辅助激光解吸电离质谱离线检测
API	大气压电离	CFA	连续流动分析
API	美国石油学会	CFT	被体结合试验
APPI	大气压光致电离	CID	电荷注入检测器
APT	依附质子试验	CIDEP	化学诱导动态电子极化
ARG	放射自显影术	CIDNP	化学感应动态核极化
ARPES	角分辨光电子谱	CIPAC	国际农药分析协作委员会
AS	原子光谱分析法	CMA	筒镜分析器
ASE	加速溶剂萃取法	CME	化学修饰电极
ASV	阳极溶出伏安法	CMP	胞苷（一磷）酸
ATP	三磷酸腺苷	COD	化学需氧量
ATR	衰减全反射	CP	Carr-Purcell 法；交叉极化
AVXPS	变角 X 射线光电子能谱深度剖析法	CPAA	带电粒子活化分析
BB	宽带去耦	CPMG	Carr-Purcell-Meiboom-Gill 法
BIRD	双线性旋转去耦	CRA	碳棒原子化器
BMS	生物质谱法	CRM	有证标准物质
BOD	生化耗（需）氧量	CRT	血块收缩试验
BRFA	带通减速场分析器	CSFC	毛细管超临界流体色谱法
BSA	背散射分析	CSRS	相干斯托克斯拉曼散射效应
BSE	背散射电子	CSV	阴极溶出伏安法
BSM	基本单纯形法	CV	循环伏安法
BT	出血时间	CW-ESR	连续波电子自旋共振
C_2D-GC	全二维气相色谱	DA	多巴胺
CAC	国际食品法典委员会	DAD	二极管阵列检测器
CAD	碰撞活化解吸	dADP	脱氧腺苷二磷酸
CARS	相干反斯托克斯拉曼散射效应	dAMP	脱氧腺苷（一磷）酸
CBE	电荷守恒式	DCC	干柱色谱法
CCC	逆流色谱法	DCCC	液滴逆流色谱法
CCD	电荷耦合检测器	DDTA	微分差热分析法
CCPA	农药残留法典委员会		
CD	环糊精		
CDA	柱偏转分析器		
CDP	胞苷二磷酸		

续表

DEPT	无畸变的极化转移增强方法	ESCA	化学分析用电子能谱法
DMA	动态热机械法	ESEEM	电子自旋回波包络线调制
DME	滴汞电极	ESEM	环境扫描电子显微镜
DNA	脱氧核糖核酸	ESI	电喷雾电离
DNasc	脱氧核糖核酸酶	ESR	电子自旋共振法
DO	溶解氧	ETA	放射热分析法
DPFGSE-NOE	双脉冲场梯度自旋回波法-核欧沃豪斯效应谱	FAAS	火焰原子吸收光谱法
		FAB	快原子轰击电离；快原子轰击源
DPP	差分脉冲极谱		
DPPH	二苯基苦基肼	Fab	抗原结合片段
DQF-COSY	双量子滤波相关谱	FAO	联合国粮食与农业组织
DRS	漫反射光谱学		
DRTP	衍生室温磷光法	FD	场解吸
DSA	动（态弹）簧分析法	FDA	美国食品药物管理局
DSC	差示扫描量热法	FFF	场流分级
DSS	4,4-二甲基-4-硅代戊磺酸钠	FFR	无场区
		FFT	快速傅里叶变换
DTG	微商热重法	FGC	官能团色谱图
EA	电子受体	FI	场致电离
ECCI	电子捕获化学电离	FIA	免疫荧光法；流动注射分析法
ECD	电子捕获检测器		
ECIA	电化学免疫分析	FID	自由感应衰减信号；氢火焰离子化检测器
ECL	电化学发光		
ECLIA	电化学发光免疫分析	FIM	场离子显微镜
E-COSY	专一化学位移相关谱	FPB	快粒子轰击电离
ED	电子给予体	FPD	火焰光度检测器
EDTA	乙二胺四乙酸	FPTA	荧光偏振免疫测定法
EELS	电子能量损失谱	FT	傅里叶变换
EGA	逸出气体分析法	FT-ESR	傅里叶变换电子自旋共振分析法
EGD	逸出气检测法		
ELDOR	电子-电子双共振	FT-ICR/MS	傅里叶变换离子回旋共振质谱仪
ELISA	酶联免疫分析法；酶联免疫吸附测定	FWHM	峰半高宽
		GAP	良好农业措施
ELSD	蒸发光散射检测器	GAs	遗传算法
EN^2TIR	电子-核-核三重共振	GC	气相色谱法
ENDOR	电子-核双共振	GC-FTIR	气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术
$E_{p/2}$	半峰电位	GC-MS	气相色谱-质谱联用仪
EPR	电子顺磁共振法	GC-HS	顶空气相色谱法

续表

GD-MS	辉光放电质谱法
GDO-ES	辉光放电光学发射光谱法
GDX	高分子多孔微球
GFAAS	石墨炉原子吸收光谱法
GFC	凝胶过滤色谱法
GH	生长激素
GL	指导性限量
GLC	气液色谱法
GLS	气液固色谱法
GMP	鸟苷（一磷）酸
GOESY	梯度增强核欧沃豪斯效应谱
GOF	一致性因子
GPC	凝胶渗透色谱法
GPT	谷丙转氨酶传感器
GSC	气固色谱法
HCL	空心阴极灯
HEED	高能电子衍射
HEISS	高能离子散射谱
HETP	理论塔板高度
HG	氢化物发生法
HG-AAS	氢化物发生-原子吸收光谱法
HG-AFS	氢化物发生-原子荧光光谱法
HMBC	¹H 核检测的异核多键相关实验
HMDSO	六甲基二硅醚
HMG	同核门控去耦
HOESY	异核欧沃豪斯效应相关谱
HOHAHA	同核 Hartmann Hahn 实验
HOM	脉冲同核去耦
HPLC	高效液相色谱法
HPLC-ESR-MS	高压液相色谱-电子自旋共振-质谱联用仪
HPLC-FTIR	高效液相色谱-傅里叶变换红外分析法
HRMS	高分辨质谱仪
HRS	超拉曼散射
HSCCC	高速逆流色谱法
HSQC	检出¹H 的异核单量子相干实验
HYSCORE	超精细子能级相关谱
IC	内转换；离子色谱法
ICE	离子排斥色谱法
ICP	电感耦合等离子体；电感耦合等离子体电离源
ICP-MS	电感耦合等离子体质谱仪
ID_{50}	半数感染剂量
IEXRF	同位素激发 X 射线荧光法
IFS	离子荧光光谱法
Ig	免疫球蛋白
IGC	反相气相色谱法
IIC	离子相互作用色谱法
IKES	离子动能谱
IMFP	非弹性平均自由程
INAA	仪器中子活化分析
INADEQUATE	天然丰度双量子转移实验
INDOR	核间双共振
INEPT	不灵敏核的极化转移增强法
INS	离子中和谱
IP	影像板
IPC	离子对色谱法
IQ	抑菌商数
IR	反转回复法；红外光谱法
IRMA	免疫放射分析法
IRS	反拉曼散射
IRSE	反转恢复自旋回波
ISC	离子抑制色谱法
ISFET	离子选择性场效应晶体管
ISP	离子喷雾

续表

缩写	中文
ISS	离子散射谱
ITMS	离子阱质谱仪
IUPAC	国际纯粹与应用化学联合会
JMPR	农药残留专家委员会联席会议
KER	动能释放
LALLS	小角激光散射光度计
LC-MS	液相色谱-质谱分析法；液相色谱-质谱联用仪
LD	致死剂量
LDI	激光解吸电离源
LDL	低密度脂蛋白
LDMS	激光解吸质谱法
LEAFS	激光激发原子荧光光谱法
LED	发光二极管
LEED	低能电子衍射
LEISS	低能离子散射谱
LGR	环路间隙共振腔
Li-TCNQ	四氰基对醌二甲烷锂
LOD-PESR	纵向检测脉冲电子自旋共振谱
LRMS	低分辨质谱仪
LSIMS	液体二次离子质谱法
LTP	低温磷光法
LVSEM	低压扫描电子显微镜
MAA	分子活化分析法
MAE	微波辅助萃取法
MALDI	基质辅助激光解吸电离
MALDI-TOF-MS	基质辅助激光解吸飞行时间质谱仪
MALLS	多角度激光光散射光度计
McAb	单克隆抗体
MCDA	磁圆二色吸收
MCI	簇轰击电离
MCIC	金属配合物离子色谱法
MDSC	调幅式差示扫描量热仪
MEM	最大熵法
MI	亚稳离子；熔融指数
MIC	最小抑菌浓度
MID	亚稳离子裂解
MIKES	质量分析离子动能谱
MIMS	膜进样质谱法
MIP-AAS	微波诱导等离子体原子吸收光谱法
MIP-AED	微波诱导等离子体原子发射光谱检测器
MIR	多次内反射
MLD	最小致死量
MOR	磁致旋光
MQF-COSY	多量子滤波相关谱
MR	甲基红
mRNA	信使核糖核酸
MRL	最大残留限量
MS	质谱法
MS/MS	串联质谱法
MSM	改进单纯形法
NAA	中子活化分析法
NDE	无损检测法
NH_3-N	氨氮
NHE	标准氢电极
NICI	负离子化学电离
NIR	近红外区
NIR-FT-SERS	近红外傅里叶变换表面增强拉曼光谱
NMR	核磁共振谱
NO_2^--N	亚硝酸盐氮
NOE	欧沃豪斯效应
NOESY	核欧沃豪斯效应谱
NPD	氮-磷检测器
NP-HPLC	正相高效液相色谱法
NPP	常规（或积分）脉冲极谱
NQR	核四极矩共振

续表

NSIC	非抑制型离子色谱法	PZC	零点荷电位
ODELDOR	光检测电子-电子双共振	QA	质量保证
ODMR	光检测磁共振	QC	质量控制
ODS	十八烷基键合硅胶	QM	质量管理
O-FID	含氧化合物分析器	QMS	四极杆质谱仪
OMA	光学多道分析仪	QRTP	猝灭室温磷光法
OMS	有机质谱法	RCT	接力相干转移谱
OPSA	氧化电势溶出法	RDF	径向分布函数
OPTLC	过压薄层色谱法	RDS	差分拉曼光谱
OTE	光透电极	RHEED	反射式高能电子衍射
PAH	多环芳烃	RIA	放射免疫分析；放射免疫测定法
PAS/FTIR	傅里叶变换红外光声光谱	RID	折射率检测器
PcAb	多克隆抗体	RLCC	旋转小室逆流色谱法
PCR	聚合酶链式反应	RMM	相对分子质量
PD	等离子体解吸	RNA	核糖核酸
PDA	二极管阵列检测器	RNAA	放射化学中子活化分析
PENDENT	检测依附核的极化增强实验	RPH	反向被动血凝试验
PET	光诱导电子转移	RP-HPLC	反相高效液相色谱法
PFT-NMR	脉冲傅里叶变换核磁共振谱	RPI	网织红细胞生成指数
PGC	多孔石墨碳	RPM	弛豫势能模型
PI	光致电离	RPP	逆向脉冲极谱法
PID	光离子化检测器	RPSA	还原电势溶出法
PIXE	质子激发X射线荧光分析	rRNA	核糖体核糖核酸
PL	纤溶酶测定	RRSE	共振拉曼光谱电化学法
PLOT	多孔层开口管柱	*RSD*	相对标准偏差
PLS	血小板寿命测定	RTP	室温磷光法
PMA	平面镜分析器	RVCE	多孔玻碳电极
POA	胰癌胚抗原	*S/N*	信噪比
PSD	位置灵敏检测器	SAM	自组膜
PSD	相敏检波；源后裂解	SAXS	X射线小角散射
PSI	大气污染物标准指数法	SC	表面化学位移
PTV	程序升温汽化器	SCE	饱和甘汞电极；二次化学平衡
PYGC	裂解气相色谱法	SchE	血清胆碱酯酶
		SCOT	载体涂层开口管柱
		SDA	球偏转能量分析器

续表

SEC	体积排斥色谱法	STM	扫描隧道显微镜
SEM	扫描电子显微镜	STPF	稳定温度石墨炉平台技术
SERRS	表面增强共振拉曼散射	STS	扫描隧道谱
SERS	表面增强拉曼散射	TBA	扭辫分析法
SFC	超临界流体色谱法	TCD	热导检测器
SFE	超临界流体萃取法	TDS	热脱附谱
SFFF	沉降场流分级	TEM	透射电子显微镜；高压电子显微镜
SHE	标准氢电极	TFFF	热场流分级
SI	国际单位制；表面电离	TG	热重分析法
SIA	自旋免疫测定法；顺序注射分析法	TGA-FTIR	热重分析-傅里叶变换红外光谱联用
SIC	抑制型离子色谱法	THGA	横向加热石墨原子化器
SID	表面诱导解离	TIC	总离子流色谱图
SIM	选择离子监测	TICT	扭曲分子内电荷转
SIMS	二次离子质谱法	TIM	总离子监测
SIMS	次级离子质谱法	TISAB	总离子强度调节缓冲液
SM	水表面微层	TLC	薄层色谱法
SMA	连续多路自动分析器	TLm	半数耐受限值
SMIA	自旋膜免疫测定法	TM	三重态机理
SNMS	二次中性粒子质谱法；溅射中性粒子质谱法	TMA	热机械分析
SPE	固相萃取	TMRL	暂定最高残留限量
SPI	选择性布居数反转	TMS	四甲基硅（烷）
SPME	固相微萃取	TNF	肿瘤坏死因子
SPT	选择性极化转移	TOCSY	总相关谱
SQUID	超导量子干涉器件	TOF	飞行时间质谱仪
SQWV	方波伏安法	TOFMS	飞行时间质谱
SR	饱和回复法	TPPI	时间与相位增量成比例的方法
SRM	选择反应监测	tRNA	转移核糖核酸
SRS	分离-反应-分离	TRS	时间分辨光谱法
SRTP	敏化室温磷光法	TS	血清运铁蛋白饱和度
SRXRF	同步辐射X射线荧光法	TSI	热喷雾电离
		TSPI	热喷雾电离
STEM	扫描透射电子显微镜	TWTA	行波管放大器
ST-ESR	饱和转移电子自旋共振	TXRF	全反射X射线荧光分析

续表

UHV	超高真空	WHO	世界卫生组织
UMP	尿苷（一磷）酸	XANES	X射线吸收近限结构
UPS	紫外光电子能谱法	XPS	X射线光电子能谱法
UT	超声波探伤	XRD	多晶X射线衍射法
UV-Vis	紫外-可见光检测器	XRF	X射线荧光；X射线荧光光谱法
WCOT	涂壁毛细管柱		
WDS	波长色散谱仪	ZAAS	塞曼原子吸收光谱法
WEFT	消除水峰的FT方法	α-FP	甲胎蛋白

Ⅵ. 国内、外主要分析化学及其相关学术期刊

一、国内期刊

（1）分析化学（FENXI HUAXUE，Chinese Journal of Analytical Chemistry）
编辑部地址：长春市人民大街159号　　邮编：130022
电话：（0431）5262017　　E-mail：fxhx@ns. ciac. ac. cn
网址：www. ciac. jl. cn/fxhx

（2）分析科学学报（FENXI KEXUE XUEBAO，Journal of Analytical Science）
编辑部地址：湖北省武昌武汉大学化学与环境科学学院
邮编：430072
电话：（027）87682248

（3）分析试验室（FENXI SHIYANSHI，Chinese Journal of Analysis Laboratory）
编辑部地址：北京新街口外大街2号　　邮编：100088
电话：（010）82013328或（010）62014488-5112　　E-mail：fenxi@public. sti. ac. cn

（4）分析测试学报（FENXI CESHI XUEBAO，Journal of instrumental analysis）
编辑部地址：广州市先烈中路100号中国广州分析测试中心内
邮编：510070
电话：（020）87759776　　E-mail：fxcxb@china. com

（5）理化检验-化学分册［LIHUA JIANYAN（HUAXUE FENCE），Physical Testing and Chemical Analysis，Part B Chemical Analysis］
编辑部地址：上海市邯郸路99号　　邮编：200437
E-mail：mppnc@81890. net

（6）冶金分析（YEJIN FENXI，Metallurgical Analysis）
编辑部地址：北京市海淀区学院南路76号　邮编：100081
电话：（010）62182398　E-mail：nacis@public. fhnet. cn. net
（7）岩矿测试（YANKUANG CESHI，Rock and Mineral Analysis）
编辑部地址：北京市阜外百万庄路26号　邮编：100037
电话：（010）68326148　E-mail：ykcs@midwest. com. cn
（8）色谱（SE PU，Chinese journal of chromatography）
编辑部地址：大连市中山路457号　邮编：116023
电话：（0411）4379021　E-mail：sepu@dicp. ac. cn
网址：www. bjb. dicp. ac. cn
（9）中华检验医学杂志（ZHONGHUA JIANYAN YIXUE ZAZHI，Chinese Journal of laboratory medicine）
编辑部地址：北京市东四西大街42号　邮编：100710
电话：（010）65122268-1447 E-mail：cmajy@public. sti. ac. cn
（10）临床检验杂志（LINCHUANG JIANYAN ZAZHI，Chinese journal of clinical laboratory science）
编辑部地址：南京市中央路42号　邮编：210008
电话：（025）7714280　E-mail：jcls@publicl. ptt. js. cn
（11）上海医学检验杂志（SHANGHAI YIXUE JIANYAN ZAZHI，Shanghai Journal of Medical Laboratory Sciences）
编辑部地址：上海市泰安路120弄3号　邮编：200052
电话：（021）62830572　电子邮件：shyxjyzzs@fm365. com
（12）药物分析杂志（YAOWU FENXI ZAZHI，Chinese Journal of Pharmaceutical Analysis）
编辑部地址：北京天坛西里2号中国检定所编辑室
邮编：100050
电话：（010）67058427　E-mail：ywfxzz@periodicals. net. cn
（13）植物检疫（ZHIWU JIANYI，Plant Quarantine）
编辑部地址：北京市朝阳区惠新西街惠新里241楼
邮编：100029
电话：（010）64912742　E-mail：zwjy@chinajournal. net. cn
（14）中国环境监测（ZHONG GUO HUANJING JIANCE，Environmental Monitoring in China）
编辑部地址：北京市朝阳区北四环东路育慧南路1号
邮编：100029

电话：(010) 84637722-2633

(15) 中国无机分析化学文摘 (ZHONGGUO WUJI FENXIHUAXUE WENZHAI, Inorganic analytical abstracts of China)
编辑部地址：北京市西直门外文兴街1号　　邮编：100044
电话：(010) 68333366-3430　　E-mail：binfubox @ mail. sparkice. com. cn

(16) 化学分析计量 (HUAXUE FENXIJILIANG, Chemical Analysis and Meterage)
编辑部地址：山东省济南市108信箱　　邮编：250031
电话：(0531) 5816706　　E-mail：master@ anameter. net

(17) 分析测试技术与仪器 (FENXI CESHI JISHU YU YIQI, Analysis and Testing Technology and Instruments)
编辑部地址：兰州市天水路342号　　邮编：730000
E-mail：FXCS@ ns. lzb. ac. cn

(18) 检验检疫科学 (JIAN YAN JIAN YI KE XUE, Inspection and Quarantine Science)
编辑部地址：北京市朝阳区麦子店街22号楼　　邮编：100026
电话：(010) 64194030　　E-mail：xdsj@ chinajournal. net. cn

(19) 分析仪器 (FENXI YIQI, Analytical Instrumentation)
编辑部地址：北京市海淀区温泉　　邮编：100095
电话：(010) 62457772-336

(20) 光谱学与光谱分析 (GUANG PU XUE YU GUANG PU FEN XI, Spectroscopy and Spectral Analysis)
编辑部地址：北京市海淀区魏公村学院南路76号
邮编：100081
电话：(010) 62181070 E-mail：chngpxygpfx@ sina. com

(21) 光谱仪器与分析 (GUANG PU YI QI YU FEN XI)
编辑部地址：北京市东直门外西八间房北京瑞利分析仪器公司
邮编：100015
电话：(010) 64362531-343 或 236

(22) 现代仪器 (XIANDAI YIQI, Modern instruments)
编辑部地址：北京市东城区灯市口大街75号　　邮编：100006
电话：(010) 65132649

(23) 中国科学 (B辑) [ZHONGGUO KEXUE (B) JI, Science in China , Series B]

编辑部地址：北京东黄城根北街16号　　邮编：100717
电话：(010) 64034134　　E-mail：scichina@scichina.com
网址：www.scichina.com

(24) 化学学报 (HUAXUE XUEBAO, ACTA CHIMICA SINICA)
编辑部地址：上海枫林路354号　　邮编：200032
Tel：(021) 64163300-2651　　E-mail：bianji@pub.sioc.ac.cn
网址：www.sioc.ac.cn

(25) 高等学校化学学报 (Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao, Chemical Journal of Chinese Universities)
编辑部地址：长春市吉林大学前卫校区　　邮编：130023
电话：(0431) 8925344　　E-mail：cjcu@mail.jlu.edu.cn

(26) 化学通报 (HUAXUE TONGBAO, Chemistry Bulletin)
编辑部地址：北京2709信箱　　邮编：100080
电话：(010) 62554183　　E-mail：hxtb@public.sti.ac.cn　　hxtb@infoc3.icas.ac.cn

(27) 光谱实验室 (GUANGPU SHIYANSHI, Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory)
编辑部地址：北京市学院南路76号7信箱主楼448房间
邮编：100081
电话：(010) 62183031　　E-mail：gpsys@263.net；gpsys81@citiz.net

(28) 环境科学学报 (HUANJING KEXUE XUEBAO, Acta Scientiae Circumstantiae)
编辑部地址：北京2871信箱　　邮编：100085
电话：(010) 62941073　　E-mail：actasc@263.net

(29) 环境化学 (HUANJING HUAXUE, Environmental Chemistry)
编辑部地址：北京2871信箱　　邮编：100085
电话：(010) 62923569

(30) 化学研究与应用 (HUAXUE YANJIU YU YINGYONG, Chemical Research and Application)
编辑部地址：成都市望江路29号四川大学化学学院内
邮编：610064
电话：(028) 5418495　　E-mail：suqcp@mail.sc.cninfo.net
网址：www.huaxueyanjiu.com.cn

(31) 质谱学报 (ZHI PU XUEBAO, Journal of Chinese Mass Spectrometry

Society)

编辑部地址：北京275信箱65分箱《质谱学报》编辑部

邮编：102413

电话：(010) 69357734

二、国外期刊

(1) Electroanalytical Chemistry

(2) Analytical Chemistry

(3) LC GC-Magazine of Separation Science

(4) Journal of the American Society for Mass Spectrometry

(5) Critical Reviews in Analytical Chemistry

(6) Electrophoresis

(7) Rapid Communications in Mass Spectrometry

(8) Journal of Chromatography A

(9) Trac-Trends in Analytical Chemistry

(10) Journal of Microcolumn Separations

(11) Analytical Biochemistry

(12) Chromatographia

(13) Analyst

(14) Journal of Analytical Toxicology

(15) Journal of Electroanalytical Chemistry

(16) Analytica Chimica Acta

(17) Electroanalysis

(18) Analytical Communications

(19) Reviews in Analytical Chemistry

(20) HRC-Journal of High Resolution Chromatography

(21) Fresenius Journal of Analytical Chemistry

(22) Journal of Chemometrics

(23) Journal of Chromatography B

(24) JPC-Journal of Planar Chromatography-Modern TLC

(25) Journal of Chromatographic Science

(26) Talanta

(27) Sensors and Actuators B-Chemical

(28) Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies

(29) Vibrational Spectroscopy

(30) Biomedical Chromatography

(31) Journal of AOAC International

(32) Microchemical Journal

(33) Analytical Letters

(34) Spectrochimica Acta Part A : Molecular and biomolecular spectroscopy

(35) Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis

(36) Phytochemical Analysis

(37) Analytical Sciences

(38) Instrumentation Science & Technology

(39) Field Analytical Chemistry and Technology

(40) International Journal of Environmental Analytical Chemistry

中 文 索 引

（以汉字笔画排序）

一画

二画

三画

四画

六画

七画

八画

九画

十画

十一画

十二画

十三画

十四画

十五画

十六画

十七画

十八画以上

其他

英 文 索 引

A

B

C

E

F

H

I

J

K

L

M

N

O

P

Q

R

S

T

U

V

W

X

Y

Z

Others